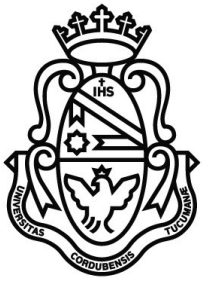
Dirección y manipulación de estados topológicos de la materia

Efectos en grafeno y otros materiales de baja dimensión

por

Virginia Dal Lago



Presentado ante la Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación
como parte de los requerimientos para la obtención del grado de

Doctora en Física

de la
UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA

Octubre, 2017

Director: Dr. Luis E. F. Foà Torres

Co-Director: Dr. Raúl A. Bustos Marún

Dirección y manipulación de estados topológicos de la materia. Efectos en grafeno y otros materiales de baja dimensión, por Virginia Dal Lago se distribuye bajo una Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-CompartirIgual 4.0 Internacional.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo no podría haber sido posible sin la ayuda y la orientación de varias personas que, de una u otra manera, contribuyeron a su desarrollo durante estos años.

En primer lugar quiero agradecer a Luis Foà Torres y Raúl Bustos Marún por acompañarme en todo el camino con sus enseñanzas, sus ideas y el trabajo en conjunto, potenciando mi aprendizaje y la obtención de distintos logros derivados de la investigación.

Agradezco también a la Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación y al Instituto de Física Enrique Gaviola, y en particular a todos sus profesores y personal, por lo brindado en estos años. A la Universidad Nacional de Córdoba, por las posibilidades ofrecidas para mi crecimiento personal. A CONICET por financiar esta etapa de trabajo y aprendizaje.

Hago expresa también mi gratitud hacia los colegas con los cuales compartí conversaciones, discusiones y proyectos, que me permitieron aprender con ellos. Al tribunal especial de tesis y a la comisión asesora, muchas gracias por acompañarme, por sus comentarios y devoluciones sobre mi trabajo.

A todos y cada uno de mis amigos y compañeros que me acompañaron día a día en este camino, ya sea compartiendo una charla, aportando sugerencias, ayudando a resolver un problema o alegrándose con mis resultados. Muchas gracias.

Un gracias enorme es para mi mamá, mi papá y mi hermano. No podría haber llegado hasta acá sin su ayuda, su presencia y su aliento. Estoy sumamente agradecida por todas las oportunidades, el amor y la confianza que me brindan. Hay sentimientos, y agradecimientos, que no se pueden expresar con palabras, y éste es uno de ellos. ¡Muchas gracias, de corazón!

RESUMEN

Los descubrimientos experimentales del grafeno y de los materiales aislantes topológicos han suscitado un gran interés en la comunidad científica, abriendo nuevos campos de investigación en ciencia básica y aplicada. El grafeno es el primer material bidimensional encontrado, compuesto por átomos de carbono ordenados en una capa de un único átomo de espesor. El confinamiento de los electrones en su interior le confiere propiedades electrónicas y ópticas récords. Por otra parte, los aislantes topológicos conectan la física de los materiales con la topología matemática. Los mismos se comportan como aislantes electrónicos en el bulk de la muestra, pero presentan estados conductores en los bordes que son altamente robustos y posibilitan el transporte electrónico direccional. Las investigaciones referidas al grafeno y a los aislantes topológicos han resultado en dos premios Nobel de física en la última década.

El objetivo de la presente tesis es estudiar los estados topológicos de grafeno y otros materiales de baja dimensión, y analizar diferentes formas de manipulación y dirección de los mismos para obtener sistemas con nuevas propiedades. Específicamente, empleamos como base el modelo de Su-Schrieffer-Heeger para polímeros conductores (modelo unidimensional), el cual presenta un carácter topológico nativo, y el grafeno. A este último se le inducen propiedades topológicas a partir de perturbaciones externas como ser campos magnéticos, términos de acoplamiento de tipo Haldane o irradiación con luz láser. Las propiedades espectrales y de transporte de los distintos materiales son calculadas a partir de simulaciones computacionales numéricas utilizando modelos atomísticos.

Como primer punto analizamos los estados de borde presentes en una muestra de grafeno con una línea de defectos y en una fase tipo Hall cuántica entera. Los defectos lineales aparecen naturalmente en los bordes de grano de muestras policristalinas, o pueden ser también diseñados artificialmente. De acuerdo a su arreglo geométrico en el sistema, éstos pueden afectar la conductancia local y la Hall de diferentes maneras. Particularmente, si la línea es paralela al borde de la muestra, obtenemos un circuito formado por resistencias en paralelo y ambas conductancias se ven incrementadas. Por el contrario, cuando el defecto une bordes opuestos, la conductancia Hall puede permanecer inalterada respecto a la de grafeno prístino. La principal característica de este último sistema es que permite el intercambio de borde sobre el cual se desplazan los electrones. De esta manera, comprobamos que es posible dirigir los estados topológicos, dividiendo el haz de electrones incidente, y convertir al grafeno

con una línea de defectos y bajo la acción de un campo magnético externo en el análogo electrónico del divisor de haces óptico.

Posteriormente nos centramos en el estudio de un aislante topológico unidimensional como es el modelo de Su-Schrieffer-Heeger. El mismo presenta estados topológicos nativos, los cuales probamos pueden ser modificados mediante una perturbación periódica en el tiempo. Empleando la teoría de Floquet, calculamos la estructura electrónica en la cual se observa la apertura de nuevos gaps que pueden presentar estados topológicos. En el caso del gap nativo comprobamos que, dependiendo de la frecuencia de la perturbación, existe una competencia entre los estados de borde nativos y aquellos generados por los diferentes procesos asistidos por fotones que determina el carácter topológico resultante del modelo. Es posible destruir los estados de borde preexistentes o bien generar nuevos estados con propiedades diferentes. Los resultados obtenidos se verifican mediante el cálculo del invariante topológico correspondiente, la fase de Zak.

El tercer problema que abordamos corresponde al transporte electrónico en sistemas del tipo metal sobre aislante topológico. Concretamente, investigamos una bicapa de grafeno bajo la acción de un voltaje de bias perpendicular externo, con términos de acople de tipo Haldane o irradiada con luz láser. Estos últimos inducen la aparición de estados de borde topológicos en una de las capas del material, los cuales coexisten con un continuo en la otra capa. Probamos que a partir de la hibridización entre ambos podemos “apagar” selectivamente los estados de uno sólo de los bordes (se localizan preferentemente en la capa metálica). Esta asimetría en la estructura de bandas puede ser aprovechada para obtener transporte unidireccional de carga, spin o valle, generando así el equivalente a un aislador óptico en electrónica.

Efectos topológicos pueden encontrarse escondidos en materiales ya conocidos de baja dimensión, y también tridimensionales, o bien generarse a través de perturbaciones externas. Entre los resultados más interesantes encontrados en esta tesis podemos destacar la posibilidad de destruir y crear selectivamente estados de borde topológicos, y de dirigir la corriente eléctrica a través de los mismos. Estos efectos, junto con la robustez de los estados involucrados, resultan atractivos para el diseño de futuros nanodispositivos y sus posteriores aplicaciones. La dirección y manipulación de los estados topológicos de borde, efectos estudiados en la presente tesis, permiten generar nuevas propiedades en los materiales y abren interesantes líneas de futuros trabajos.

ÍNDICE GENERAL

Resumen v

1. Introducción 1
- 1.1. Grafeno . . . 2
  - 1.1.1. Detalles experimentales . . . 4
  - 1.1.2. Modelo atomístico . . . 7
  - 1.1.3. Estructura electrónica . . . 11
- 1.2. Aislantes topológicos . . . 16
  - 1.2.1. Efecto Hall cuántico entero . . . 17
  - 1.2.2. Thouless y los invariantes topológicos . . . 20
  - 1.2.3. Modelo de Haldane . . . 22
  - 1.2.4. Modelo de Kane – Mele: efecto Hall cuántico de spin (QSH) . . . 24
  - 1.2.5. Sistemas forzados periódicamente . . . 26
  - 1.2.6. Modelo de Su-Schieffer-Heeger (SSH): aislante topológico unidimensional . . . 27
  - 1.2.7. Aislantes topológicos tridimensionales . . . 32
- 1.3. Sobre esta tesis . . . 33

2. QHE en grafeno con una línea de defectos 35
- 2.1. Defecto lineal tipo 5-8-5 . . . 36
- 2.2. Modelo atomístico . . . 37
  - 2.2.1. Parámetros empleados en las simulaciones computacionales . . . 39
- 2.3. Estructura electrónica . . . 39
  - 2.3.1. Formación del defecto lineal . . . 42
  - 2.3.2. Correcciones a la parametrización . . . 43
- 2.4. Estados de scattering . . . 44
- 2.5. Transporte electrónico . . . 47
  - 2.5.1. Modelo teórico mínimo . . . 50
  - 2.5.2. Efecto de la geometría en la respuesta Hall . . . 53
- 2.6. Desorden y tensión . . . 55
  - 2.6.1. Desorden de Anderson . . . 55
  - 2.6.2. Vacancias . . . 57
  - 2.6.3. Impurezas de largo alcance . . . 58
  - 2.6.4. Tensión . . . 59

2.7. Defecto lineal tipo 5-7-7-5 (Stone-Wales) 61
2.7.1. Modelo atomístico 62
2.7.2. Estructura electrónica 62
2.7.3. Transporte electrónico 64
2.8. A modo de resumen 66

3. Estados topológicos en el modelo SSH forzado 69
3.1. Teoría de Floquet 70
3.1.1. Formalismo de Floquet 71
3.1.2. Formalismo de Floquet en forma matricial 72
3.2. Modelo atomístico 75
3.2.1. Teoría de Floquet aplicada al modelo atomístico 77
3.2.2. Parámetros empleados en las simulaciones computacionales . 78
3.3. Estructura electrónica 78
3.3.1. Modelo SSH forzado 80
3.3.2. Regímenes de alta y baja frecuencia 82
3.3.3. Diagrama de frecuencias 83
3.4. Topología 86
3.4.1. Estados de borde de Floquet 87
3.4.2. Fase de Zak 90
3.5. A modo de resumen 94

4. Transporte direccional 97
4.1. Modelo atomístico 98
4.1.1. Bicapa de grafeno con acoplamiento tipo Haldane 100
4.1.2. Bicapa de grafeno irradiada 101
4.1.3. Parámetros empleados en las simulaciones computacionales 106
4.2. Estructura electrónica 108
4.2.1. Bicapa de grafeno con acoplamiento tipo Haldane 109
4.2.2. Bicapa de grafeno irradiada 116
4.3. Transporte electrónico 119
4.3.1. Aislador electrónico 124
4.3.2. Desorden y rugosidad 125
4.4. A modo de resumen 132

5. Conclusión 135

Bibliografía 141

Capítulo 1

Introducción

En los últimos 15 años dos nuevas familias de materiales han surgido, expandiendo el campo de investigación en ciencia tanto básica como aplicada: los materiales bidimensionales y los aislantes topológicos. En 2004, Konstantin Novoselov y Andre Geim aislaron por primera vez grafeno, un material compuesto únicamente por átomos de carbono [1]. El mismo presenta como característica sobresaliente su espesor de sólo un átomo, y puede ser considerado como bidimensional [2]. Debido al confinamiento de los electrones en su interior, muestra diferentes propiedades récords que pueden resultar de gran utilidad en aplicaciones tecnológicas [3-6]. El descubrimiento del grafeno brindó el puntapié inicial para la búsqueda y el hallazgo de muchos otros materiales bidimensionales como el siliceno (formado por átomos de silicio) [7-9] y el fosforeno (de fósforo) [10, 11].

Por otra parte, en el año 2007, el grupo dirigido por Shou-Cheng Zhang observó experimentalmente la existencia de estados topológicos en pozos cuánticos de telururo de mercurio (HgTe) [12, 13]. Esta fue la primera determinación de un aislante topológico intrínseco. Un par de décadas antes, Klaus von Klitzing había descubierto el efecto Hall cuántico en un gas de electrones bidimensionales en presencia de un campo magnético externo intenso [14]. Ambos casos, suscitaron un gran interés en la comunidad científica debido a las potenciales aplicaciones que pueden aprovechar la robustez y direccionalidad del transporte electrónico o de spin en los aislantes topológicos.

Estos descubrimientos generaron grandes avances en diversos campos de la física. Uno de ellos es el de materia condensada que se centra en el descubrimiento y clasificación de las distintas fases de la materia. Además, permitieron conectar dos áreas científicas hasta el momento independientes: la topología (rama de la matemática) y la ciencia de materiales (rama de la física). Es así que, en los últimos diez años se desarrolló un nuevo campo de investigación cuyo objetivo es el estudio teórico y experimental de materiales que se comportan como aislantes topológicos [15, 16].

Dos premios Nobel de física, o mejor dicho el trabajo realizado por sus ganadores, sientan las bases de esta tesis. El primero de ellos fue el obtenido por Geim y Novoselov en el año 2010 por sus innovadores experimentos respecto al material bidimensional grafeno [17]. El segundo fue otorgado en el año 2016 a David J. Thou-

less, F. Duncan M. Haldane y J. Michael Kosterlitz por sus descubrimientos teóricos de las transiciones de fases topológicas y las fases de la materia topológicas [18]. En la presente tesis, nos centramos en el estudio de formas de manipulación y dirección de estados topológicos de la materia generados en grafeno y otros materiales de baja dimensión.

1.1. Grafeno

Históricamente los dos alótropos conocidos del carbono fueron el diamante y el grafito [6]. Ambos materiales tridimensionales son empleados en aplicaciones muy diversas debido a sus características tan diferentes (como por ejemplo su dureza y conductividada eléctrica). Sin embargo, más recientemente, comenzaron a surgir nuevos materiales derivados del carbono. En 1985 se descubrieron los fulerenos, moléculas de carbono en forma esférica (cuya estructura se asemeja a una pelota de fútbol)[19, 20]; y alrededor de 1991 los primeros artículos referidos a nanotubos de carbono (tubos de diámetro nanométrico) fueron publicados [21, 22].

El siguiente paso en la miniaturización de materiales formados por carbono era la obtención de una hoja de un único átomo de espesor, que puede considerarse como bidimensional, a la cual hoy conocemos como grafeno. Si bien se hipotetizó y estudió teóricamente durante muchas décadas, una parte de la comunidad científica creía que era termodinámicamente inestable y que por ende no se iba a poder obtener experimentalmente. Hasta que, en el año 2004, Novoselov y Geim consiguieron aislar a partir de una muestra de grafito, y de manera estable, una única monocapa de grafeno [1]. De esta manera, con el transcurrir de los años, la ciencia pasó de ocuparse sólo del carbono en sus versiones tridimensionales, a estudiarlo en sus distintas configuraciones bidimensionales [23-25].

El grafeno es la base del grafito, material en el cual varias de estas capas se apilan una sobre otra con un dado orden (figura 1.1). Sin embargo, la ausencia de volumen le confiere propiedades diferentes, en muchos casos récords, y de sumo interés para distintas aplicaciones. Por ejemplo, es el material más fuerte que se haya medido (aún más que el diamante) [26], tiene una conductividad térmica y una densidad de corriente excelsas [27-30], y es capaz de convertir luz visible e infrarroja en corriente eléctrica [31]. Hoy en día no existe otro material más allá del grafeno que tenga tantas buenas características para aplicaciones ópticas y electrónicas [32]. De hecho, decenas de potenciales aplicaciones han sido propuestas desde su descubrimiento que van desde chips de computadoras que permitirían un funcionamiento más rápido [33, 34] y celdas solares hiper eficientes [31, 35], a membranas de desalinización [36, 37] y escáneres médicos y de seguridad [38, 39], entre otras.

Figura 1.1: Fotografías de una muestra de grafito natural de Sri Lanka, donde se observa su estructura laminar. *Imágenes de Luis E. F. Foà Torres*.

1.1.1. Detalles experimentales

La bidimensionalidad del grafeno es la responsable de las diferencias en las propiedades físicas, químicas, electrónicas y ópticas respecto del grafito. Sus características son en gran medida extraordinarias, despertando un elevado interés en la comunidad científica [6]. En relación a sus propiedades mecánicas por ejemplo, además de ser el material más fino que podemos imaginar, es el más fuerte alguna vez medido con una resistencia a la tracción intrínseca de 130 GPa (aproximadamente 200 veces mayor a la del acero más fuerte). Sin embargo, es un material muy flexible cuyo módulo de Young (que da cuenta del grado en el cual un material resiste la deformación frente a una fuerza aplicada) es de 1 TPa [26]. Otras propiedades de interés del grafeno incluyen su impermeabilidad (algunos autores informan que sólo los protones son capaces de atravesarlo [40, 41]) y su alta conductividad térmica de entre 1500 y 2500 $Wm^{-1}K^{-1}$ a temperatura ambiente (mayor a la de metales y el diamante) [42-44].

En el área de la electrónica, el grafeno también ha cobrado notoriedad desde su descubrimiento por sus propiedades y múltiples posibles aplicaciones. Debido a su peculiar estructura de bandas (la cual analizaremos en sección 1.1.3), los transportadores de carga son los más “livianos” que se pueden encontrar ya que se comportan como fermiones de Dirac sin masa. Además, el camino libre medio de los electrones a temperatura ambiente es del orden de los micrómetros, el más largo hallado en un material [45]. De esta manera, el grafeno presenta la mayor densidad de corriente posible a temperatura ambiente, un millón de veces superior a la del cobre (material ampliamente utilizado en la industria electrónica) [25, 30].

Desde el punto de vista óptico, una de las características más prominentes del grafeno es su alta transparencia (la absorción de luz blanca es aproximadamente del 2,3 % [31]). Esta propiedad, combinada con el carácter conductor, puede originar su primera gran aplicación en la industria: las pantallas táctiles flexibles para teléfonos inteligentes [46, 47]. Por otra parte, debido a la particular estructura electrónica, el grafeno es capaz de convertir luz visible e infrarroja en corriente eléctrica, siendo de potencial utilidad para celdas solares de alta eficiencia [31, 48, 49].

Para la aplicación del grafeno en la industria, donde se aprovechen todas sus propiedades extraordinarias, es necesario poder obtenerlo experimentalmente a bajo costo, gran escala y manteniendo la estructura del mismo (es decir con el menor número de defectos posible). De hecho, hoy en día los costos de las pantallas realizadas a partir de grafeno son mayores a los de aquellas ya existentes en el mercado. Sin embargo, éstos están disminuyendo rápidamente a medida que se acelera la escala en la producción.

El primer método de síntesis de grafeno desarrollado fue llevado a cabo por Novoselov y Geim, y consiste en la exfoliación micromecánica de una muestra de grafito pirolítico altamente orientado (HOPG por sus siglas en inglés) [1]. Para ello se coloca el grafito sobre una cinta adhesiva, la cual se pliega sobre sí misma, pegándose y despegándose reiteradas veces de manera tal que se decapa el grafito

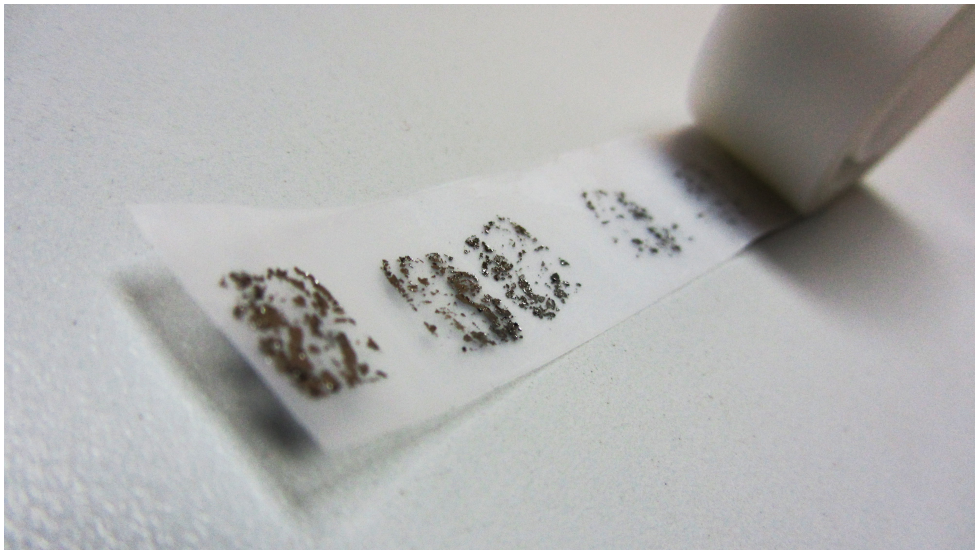


Figura 1.2: Fotografía del proceso de exfoliación micromecánica de grafito pirolítico altamente orientado (HOPG) para la obtención de grafeno. *Imagen de Luis E. F. Foà Torres*.

hasta obtener láminas de grafeno de diferentes número de capas (figura 1.2). La ventaja de este método es su sencillez y la baja densidad de defectos de las muestras conseguidas. No obstante, las láminas son de apenas 1 micrómetro cuadrado de área en promedio por lo que su costo es de aproximadamente 1000 dólares, transformando al grafeno en el material más caro del planeta. Además, para la producción a escala industrial, la exfoliación micromecánica es muy lenta y delicada [50, 51].

En la actualidad existen otras alternativas posibles para la obtención de grafeno a mayor escala [51, 52]. Entre ellas se encuentran la deposición química por vapor (CVD por sus siglas en inglés) [53, 54], el crecimiento epitaxial sobre sustratos de carburo de silicio [55, 56] y la exfoliación en fase líquida mediante ultrasonicación [57, 58]. En estos casos las muestras que se obtienen son en general de mayor tamaño, alcanzándose hojas de grafeno CVD de hasta 30 pulgadas (figura 1.3) [59]. Sin embargo, el mayor obstáculo se encuentra en las fallas y rasgaduras a escala atómica que suelen presentarse en las muestras obtenidas mediante estos métodos industriales. Los defectos originan la pérdida de las propiedades encontradas en las pequeñas láminas de mayor calidad que se analizan en los laboratorios. Por lo tanto para impulsar la aplicación del grafeno en la industria, reduciendo los costos de producción, sería útil encontrar, o perfeccionar, un método de síntesis que genere monocapas de alta calidad y a gran escala.

Fallas y defectos

En las muestras de grafeno obtenidas experimentalmente, las arrugas [60], los “charcos” de cargas (acumulaciones de cargas) [61] y otros defectos [62] pueden ser más frecuentes de lo deseado. Dentro de los defectos más comunes podemos mencionar las vacancias (ausencia de átomos en la red), los defectos de carácter

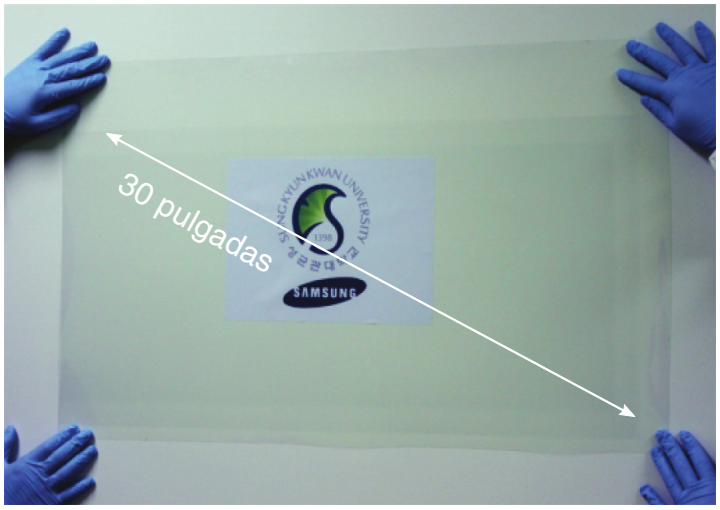


Figura 1.3: Fotografía de una hoja de grafeno de 30 pulgadas sintetizada a través del método de deposición química por vapor. *Imagen adaptada de [59].*

topológico y los adsorbatos (átomos o moléculas adsorbidas sobre el grafeno) [63, 64]. La presencia de las fallas y defectos depende no sólo del método de síntesis [58, 62, 65] sino también de otros factores como por ejemplo el carácter suspendido/no suspendido de la hoja de grafeno sobre el sustrato.

Si bien las técnicas de crecimiento u obtención de grafeno han evolucionado significativamente en los últimos años, como se explicó en la sección anterior, algunos defectos son todavía persistentes y resultan difíciles de evitar o eliminar. Este es el caso de los defectos lineales, aquellos que se extienden a lo largo de una línea en la muestra [66]. Éstos pueden ser de origen natural, como los que se generan en los bordes de grano de una muestra de grafeno policristalina (figura 1.4) [67], o también pueden ser artificialmente diseñados. Una línea de defecto particular que se encuentra en el grafeno es la de tipo 5-8-5, donde un enlace entre dos hexágonos contiguos de la red se rota para formar un pentágono y un octógono (figura 1.5) [68, 69]. Este defecto lineal puede ser obtenido artificialmente a partir de una elección apropiada del sustrato empleado en la síntesis [70], o bien por irradiación electrónica y calentamiento Joule simultáneos en ubicaciones predeterminadas de muestras de grafeno suspendidas [68].

En general, las fallas y los defectos resultan perjudiciales para las aplicaciones industriales del grafeno. Sin embargo, existen situaciones donde éstos pueden ser explotados con nuevos fines. Por ejemplo, una línea de defectos puede actuar como un canal conductor análogo a un cable metálico dentro de la muestra [70, 71]. De hecho, este canal puede comportarse como un análogo electrónico del divisor de haces óptico, permitiendo o desviando el paso de electrones en la muestra de grafeno [72]. Los defectos lineales se pueden emplear también como filtros de valles para valletrónica, una rama de la electrónica que se basa en la polarización de los estados electrónicos por valle (familias de electrones en un cristal que se diferencian en el pseudomomento k, sección 1.1.3) [73, 74].

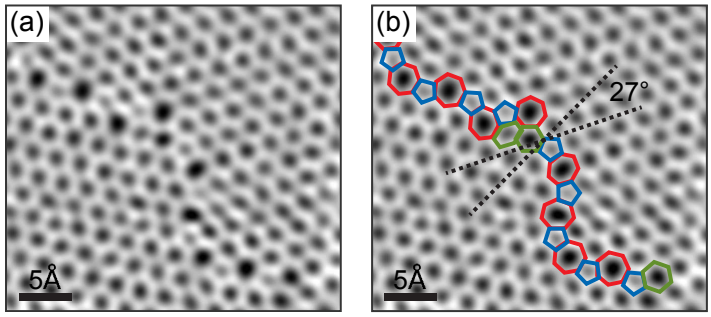


Figura 1.4: Imagen de microscopía electrónica de barrido por transmisión (STEM) de una muestra de grafeno policristalina donde se observa la línea de defectos que separa dos granos. Los pentágonos (azules), heptágonos (rojos) y hexágonos distorsionados (verdes) del borde de grano están remarcados en (b). *Imagen adaptada de [67].*

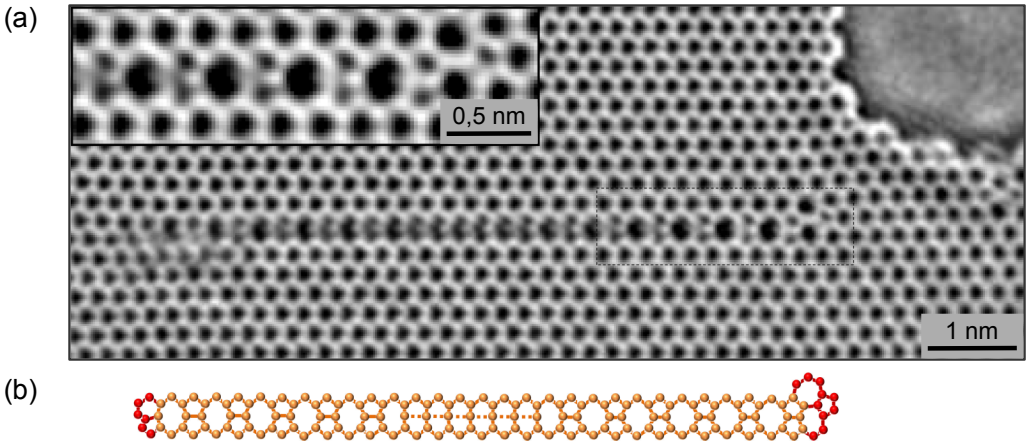


Figura 1.5: (a) Imagen de microscopía de transmisión electrónica de una muestra de grafeno con una línea de defectos tipo 5-8-5 generada a partir del calentamiento Joule por la aplicación de una corriente eléctrica. (b) Esquema de la línea de defectos tipo 5-8-5 presentada en (a). *Imagen adaptada de [68].*

1.1.2. Modelo atomístico

Una hoja de grafeno que se extiende en el espacio presenta los átomos de carbono en un arreglo hexagonal tipo panal de abeja (figura 1.6 (a)) [6]. El carbono presenta cuatro electrones en su capa de valencia, distribuidos entre los orbitales $(2s,\, 2p_x,\, 2p_y,\, 2p_z)$ (con z la dirección perpendicular a la hoja). Para formar enlaces en el plano con los tres átomos vecinos, estos orbitales se rehibridizan de manera tal que se generan tres de tipo sp^2 localizados en el plano, mientras que el orbital p_z permanece inalterado (figura 1.6 (a)). Este último es perpendicular a la hoja de grafeno, de manera tal que el solapamiento entre los orbitales híbridos y el p_z es nulo [75].

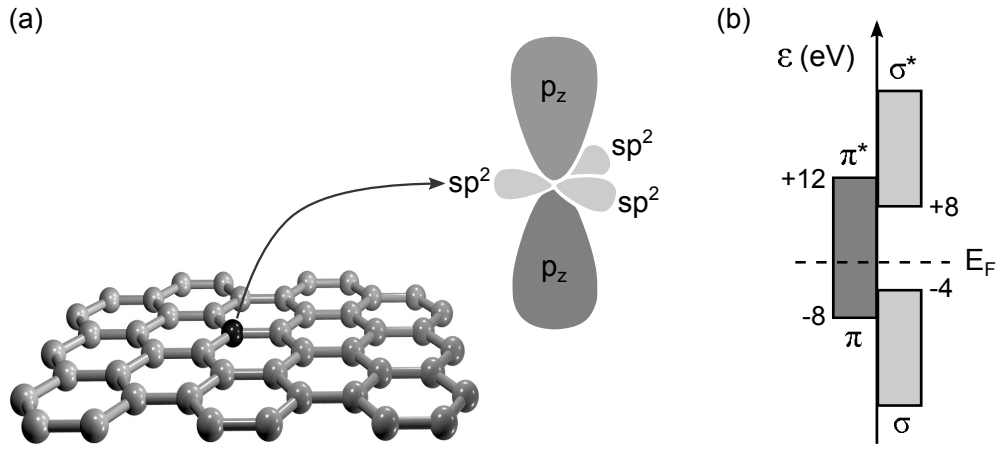


Figura 1.6: (a) Esquema de una hoja de grafeno formada por átomos de carbono en un arreglo hexagonal. Cada átomo presenta tres orbitales híbridos sp^2 localizados en el plano y un orbitar p_z perpendicular al mismo. (b) Esquema de energías de los orbitales moleculares del grafeno. *Figura adaptada de [6].*

Los orbitales sp^2 de átomos de carbono vecinos interactúan entre ellos formando enlaces covalentes representados por los orbitales moleculares enlazantes σ y antienlazantes σ^*. Éstos se encuentran localizados en el plano del grafeno y son simétricos respecto de las rotaciones tanto en el eje x como en el eje y. Por otra parte, los orbitales p_z restantes también interactúan con los orbitales vecinos pero solapándose lateralmente, generando los orbitales moleculares enlazante π y antienlazante π^* [75]. De esta manera se forma una nube electrónica deslocalizada por toda la muestra y ubicada por encima y por debajo del plano de grafeno. Además, estos orbitales son los responsables de mantener la estructura tridimensional de grafito (formado por capas apiladas de grafeno) a través de la interacción débil de tipo van der Waals entre capas adyacentes [76].

Las bandas electrónicas correspondientes a los orbitales enlazantes σ y antienlazantes σ^* están separadas fuertemente en energía (alrededor de 12 eV, figura 1.6 (b)). En el rango de energía intermedio se ubican las bandas asociadas a los orbitales π y π^*, que se cruzan en el punto de neutralidad de carga (es decir, la energía de Fermi del grafeno sin dopar) determinando así las bandas de conducción y de valencia. La diferencia energética entre los distintos orbitales moleculares se debe principalmente a la diferencia en el grado de solapamiento de los orbitales atómicos. En el caso del enlace covalente σ, el solapamiento es frontal y por ende más fuerte que para el π donde la interacción entre vecinos es lateral. Los orbitales moleculares σ determinan entonces la estabilidad energética del grafeno y sus propiedades elásticas [6], mientras que los π describen de manera completa las excitaciones electrónicas a baja energía en grafeno [77].

La red cristalina del grafeno puede ser descripta como una red triangular de Bravais con base (figura 1.7 (a)) [6, 78], donde cada celda unidad (área sombreada) presenta dos átomos (A y B) inequivalentes. Los vectores base ($\boldsymbol{a}_1$ y $\boldsymbol{a}_2$) están

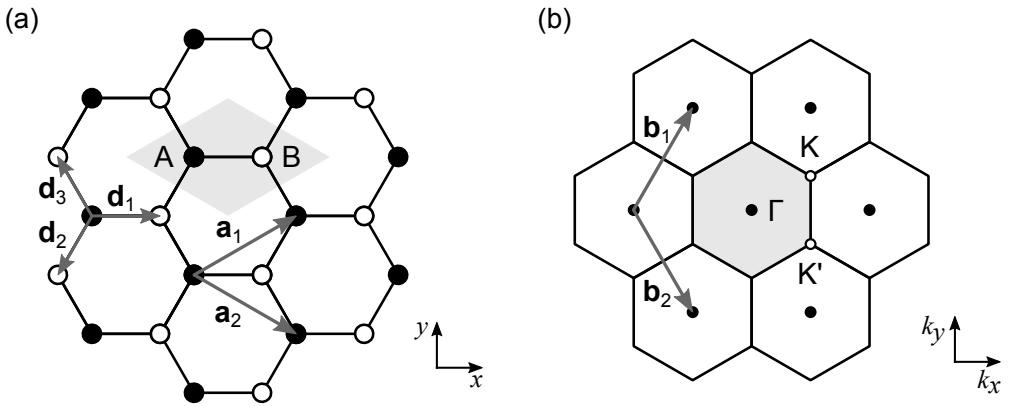


Figura 1.7: (a) Esquema de la red cristalina del grafeno, la cual corresponde a una red triangular de Bravais con base dada por los sitios de tipo A y B (marcados en negro y blanco, respectivamente). Los vectores base de la red ($\boldsymbol{a}_1$ y $\boldsymbol{a}_2$) están representados con flechas y la celda unidad por el área gris sombreada. (b) Esquema de la red recíproca del grafeno. Los vectores base asociados ($\boldsymbol{b}_1$ y $\boldsymbol{b}_2$) están representados con flechas y la primera zona de Brillouin por el área gris sombreada. Los tres puntos de alta simetría, Γ (centro de la primera zona de Brillouin), K y K', están indicados en la figura. *Figura adaptada de [6].*

definidos por:

$$\boldsymbol{a}_1 = a\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right) \qquad \boldsymbol{a}_2 = a\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right) \tag{1.1}$$

con $a = \sqrt{3}\,a_{\text{cc}}$ y $a_{\text{cc}} = 0{,}142\,\text{nm}$ la distancia entre átomos de carbono vecinos en grafeno. Podemos notar en la figura 1.7 (a) que cada sitio de un dado tipo (A o B, círculos llenos y vacíos respectivamente) está rodeado sólo por sitios del tipo opuesto (B o A). Es decir que los primeros vecinos corresponden a átomos que forman parte de la otra subred, donde la separación está dada por los vectores de desplazamiento:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{d}_1 &= a_{\text{cc}}\,(1, 0) \\ \boldsymbol{d}_2 &= a_{\text{cc}}\left(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right) = \boldsymbol{d}_1 - \boldsymbol{a}_1 \\ \boldsymbol{d}_3 &= a_{\text{cc}}\left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right) = \boldsymbol{d}_1 - \boldsymbol{a}_2 \end{aligned} \tag{1.2}$$

La figura 1.7 (b) presenta la red recíproca del grafeno. La misma se define a partir de los vectores de red recíprocos $\boldsymbol{b}_j$ (con $j = 1, 2$) determinados por la condición $\boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$:

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}\,a}\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right) \qquad \boldsymbol{b}_2 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}\,a}\left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \tag{1.3}$$

El área sombreada en la figura corresponde a la primera zona de Brillouin, la cual está construida como la celda de Wigner-Seitz de la red recíproca [78]. Como la red de Bravais es de tipo triangular, la primera zona de Briolluin adquiere forma hexagonal (es importante resaltar que no se debe a la base de dos átomos del grafeno, que de

hecho no se considera en el cálculo de los vectores de red recíproca). Al igual que en el caso de la red real, sólo dos de los seis vértices son inequivalentes, mientras que los restantes se obtienen por el desplazamiento de uno de ellos en un vector $\boldsymbol{b}_j$ (con $j = 1, 2$). Estos dos puntos inequivalentes, que son también especiales en la estructura electrónica (sección 1.1.3), se denotan por K y K', y se pueden elegir como:

$$K = \frac{4\pi}{3a}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right) \qquad K' = \frac{4\pi}{3a}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right) \tag{1.4}$$

Modelo tight-binding

Para describir a los electrones en el grafeno cerca de la energía de Fermi se utiliza un Hamiltoniano de tipo tight-binding [6, 79, 80]. Debido a la diferencia energética entre los orbitales moleculares σ y π, y a que la banda asociada a estos últimos es la que se encuentra a la energía de Fermi (figura 1.6 (b)), consideramos únicamente a los orbitales atómicos p_z para el modelo atomístico. De esta manera, el Hamiltoniano resultante de segunda cuantización queda expresado como:

$$\mathcal{H} = \sum_i E_i \, c_i^\dagger c_i - \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\gamma_{ij} \, c_i^\dagger c_j + \text{c.h.}\right) \tag{1.5}$$

donde $c_i^\dagger$ y c_i son los operadores de creación y aniquilación en el orbital π del sitio i. Además, E_i es la energía de sitio (A o B) la cual puede fijarse igual a cero como referencia. El solapamiento entre orbitales vecinos está considerado en los elementos de matriz de hopping γ_{ij}, los cuales dan cuenta del costo energético de que un electrón pase del sitio i al sitio j. En ausencia de perturbaciones externas, el hopping en grafeno adquiere el valor de $\gamma_0 = 2{,}7$ eV [80]. Por último, c.h. representa el conjugado Hermitiano del término anterior.

Si la red cristalina del grafeno es perfecta, es decir todos los sitios tienen idéntica energía (E_A puede ser distinto de E_B) y las distancias (d_i, con $i = 1, 2, 3$) se mantienen constantes, el sistema presenta simetría de invarianza traslacional. En este caso, y para una muestra infinita (bulk), es posible emplear el teorema de Bloch [81]. El mismo enuncia que para los electrones en un cristal perfecto, existe una base de funciones de onda que cumplen: i) cada una de ellas es un autoestado de energía del Hamiltoniano, y ii) cada una de ellas es una función de Bloch, lo que implica que la función de onda puede ser escrita como $\psi(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u(\mathbf{r})$, donde u tiene la misma periodicidad que la estructura atómica del cristal y se define a $\boldsymbol{k}$ como el vector de onda.

Utilizando el teorema de Bloch en su versión discretizada [78], podemos escribir el Hamiltoniano del grafeno, en ausencia de perturbaciones externas, en la base de los sitios A y B. En este caso el vector de onda $\boldsymbol{k} = (k_x, k_y)$ es un vector de dos componentes en el plano xy y dentro de la primera zona de Brillouin. De esta manera

el Hamiltoniano tight-binding queda representado de forma matricial como:

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{k}) = \begin{pmatrix} E_A & \gamma_0 \sum_{j=1}^{3} e^{-\mathrm{i}\,\boldsymbol{d}_j \cdot \boldsymbol{k}} \\ \gamma_0 \sum_{j=1}^{3} e^{\mathrm{i}\,\boldsymbol{d}_j \cdot \boldsymbol{k}} & E_B \end{pmatrix} \tag{1.6}$$

1.1.3. Estructura electrónica

El espectro de energías del grafeno puede ser calculado a partir de la diagonalización del Hamiltoniano tight-binding (ecuación 1.6) [78]. Considerando una muestra de grafeno pura, donde $E_A = E_B = 0$, la relación de dispersión está determinada por la ecuación:

$$\varepsilon(\boldsymbol{k}) = \pm\gamma_0 \left| e^{\mathrm{i}\,\boldsymbol{d}_1\boldsymbol{k}} + e^{\mathrm{i}\,\boldsymbol{d}_2\boldsymbol{k}} + e^{\mathrm{i}\,\boldsymbol{d}_3\boldsymbol{k}} \right|$$

Reemplazando por los valores correspondientes de los vectores de desplazamiento (ecuación 1.2), y realizando los pasos algebraicos necesarios, obtenemos finalmente:

$$\varepsilon(k_x, k_y) = \pm\gamma_0 \sqrt{1 + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a\right)\cos\left(\frac{1}{2}k_y a\right) + 4\cos^2\left(\frac{1}{2}k_y a\right)} \tag{1.7}$$

En la figura 1.8 se presenta la estructura electrónica del grafeno (ecuación 1.7). La misma está formada por dos bandas: la correspondiente al orbital molecular antienlazante π^* definida por la rama positiva de la ecuación 1.7, y la asociada a la banda enlazante π determinada por el valor negativo de la ecuación. Considerando que cada orbital p_z de los átomos de carbono que forman el grafeno presenta un único electrón (los otros tres electrones de valencia conforman los orbitales σ, sección 1.1.2), sólo la rama negativa de la relación de dispersión está ocupada (y en su totalidad) para el grafeno eléctricamente neutro. Por lo tanto, la energía de Fermi se encuentra a energía cero correspondiente a la energía de referencia ($E_A = E_B = 0$). De esta manera podemos definir a las bandas π y π^* como las bandas de valencia y conducción, respectivamente.

Un primer aspecto a resaltar a partir de la ecuación 1.7 es que las dos bandas de la estructura electrónica del grafeno coinciden a energía cero (figura 1.8). Esto ocurre en valores característicos de $\boldsymbol{k}$ que corresponden precisamente a K y K' (ecuación 1.4). La superficie de Fermi está compuesta entonces por los vértices del hexágono de la primera zona de Brillouin de la red recíproca. La ausencia de un gap en la estructura electrónica del grafeno le otorga comportamiento metálico. Sin embargo, debido a que la superficie de Fermi tiene dimensión cero (son sólo puntos aislados), usualmente se define al grafeno como semi-metal o semiconductor de gap nulo.

Una segunda particularidad del espectro de energías del grafeno es su simetría electrón-hueco, es decir respecto de $\varepsilon(\boldsymbol{k}) = 0$. Específicamente, esta relación implica

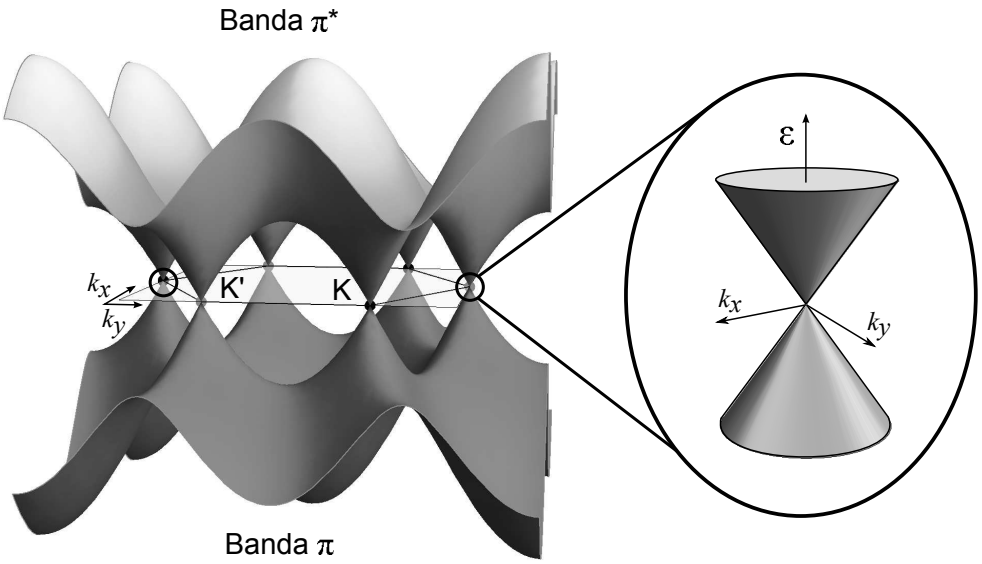


Figura 1.8: Estructura electrónica del grafeno obtenida a partir del Hamiltoniano de tipo tight-binding, donde se observan las bandas π y π^*. En el esquema insertado se presenta la relación de dispersión de tipo Dirac alrededor de los puntos de alta simetría K y K', conocida como "cono de Dirac". *Figura adaptada de [6].*

que si existe un estado electrónico de energía $+\varepsilon(\boldsymbol{k})$, entonces también existe uno de energía $-\varepsilon(\boldsymbol{k})$. La simetría electrón-hueco surge naturalmente por la estructura de red cristalina del grafeno considerada al momento de construir el Hamiltoniano tight-binding. Dado que el mismo es una aproximación, es posible incorporar términos que añaden pequeñas correcciones a la estructura de bandas (como por ejemplo los elementos de matriz de hopping a segundos vecinos), los cuales producen, entre otros efectos, la ruptura de la simetría. Sin embargo, dichas correcciones son significativas principalmente a altas energías [6], por lo que alrededor de la energía de Fermi es posible despreciarlas, preservando la simetría electrón-hueco.

Otras características interesantes de la estructura electrónica pueden hallarse al centrarnos en la zona de bajas energías (alrededor de $\varepsilon(\boldsymbol{k}) = 0$). Expandiendo la ecuación 1.7 alrededor de los puntos K y K', obtenemos para las bandas de valencia y de conducción:

$$\varepsilon(\delta\boldsymbol{k}) = \pm\hbar\, v_F\, |\delta\boldsymbol{k}| \tag{1.8}$$

donde $\delta\boldsymbol{k}$ es la desviación de $\boldsymbol{k}$ respecto de K o K' y v_F es la velocidad de grupo a la energía de Fermi ($v_F = \sqrt{3}\gamma_0 a/(2\hbar)$). En primer lugar, podemos notar que la relación de dispersión calculada es lineal en $\delta\boldsymbol{k}$. Pero esta linealidad además presenta una peculiaridad y es su equivalencia con la ecuación relativista de Dirac ($\varepsilon^2 = m^2c^4 + p^2c^2$) para fermiones sin masa [82]. De esta manera, las propiedades electrónicas alrededor de K y K' imitan las de los fermiones sin masa formando "conos de Dirac" en la relación de dispersión (figura 1.8) [3]. Los vértices de estos conos corresponden justamente a K y K', los cuales reciben por este motivo el

nombre de puntos de Dirac. Además, el espacio de momento $\boldsymbol{k}$ expandido por cada uno de los dos conos inequivalentes se denomina valle. La velocidad de grupo, cuyo valor es inusualmente alto ($v_F \approx 1 \cdot 10^6$ m/s), representa, en el contexto de la ecuación de Dirac, una "velocidad de la luz" efectiva. [6, 83].

Muchas de las peculiares propiedades y múltiples posibles aplicaciones del grafeno pueden ser entendidas a partir de esta peculiar estructura de bandas. Por ejemplo, se determinó que muestras de este material exhiben transporte electrónico balístico sobre escalas micrométricas aun a temperatura ambiente [45], lo cual se explica por el carácter relativista de los electrones de conducción. Esta propiedad puede ser explotada en la construcción de transistores para chips de computadora capaces de procesar información a tasas mucho más altas que los actuales dispositivos basados en silicio [29, 34, 84]. Sin embargo, existe un importante obstáculo para el empleo del grafeno en electrónica, producto también de su estructura de bandas de tipo relativista. La ausencia de un gap de energía en la relación de dispersión (figura 1.8) impide apagar la corriente eléctrica una vez que la misma comienza a fluir. Por lo tanto, no es posible (o resulta más complejo) realizar operaciones lógicas basadas en el encendido y apagado de la corriente, las cuales son la base fundamental de la electrónica digital.

Estructura electrónica para cintas de grafeno

En la familia del grafito y el grafeno existen otros materiales derivados como lo son las cintas de grafeno y los nanotubos de carbono [22, 62]. Estos últimos pueden ser considerados como materiales unidimensionales dada la relación entre su ancho (del orden de los nanómetros) y su largo (que puede ser hasta de milímetros). De igual manera que las propiedades del grafeno bidimensional difieren de las del grafito tridimensional, las características electrónicas de los nanotubos y de las cintas de grafeno también presentan ciertas particularidades.

En la presente tesis nos basaremos principalmente en muestras correspondientes a cintas de grafeno. Experimentalmente las mismas pueden ser obtenidas a partir de procesos litográficos de una hoja de grafeno [85] o por deposición química de vapor sobre sustratos escalonados [86, 87]. También es posible generar cintas abriendo y desenrollando nanotubos de carbono, para los cuales los procesos de síntesis están más desarrollados (dado que su aparición data de 1991, años antes que el grafeno [21]), ya sea por métodos químicos [88] o físicos [89].

Partiendo de una hoja de grafeno extendida (bulk), es posible obtener cintas con distintos tipos de borde según la dirección de corte. En la figura 1.9 (a) se presentan las dos direcciones típicas dada la regularidad de la estructura de red: armchair y zigzag. En el primer caso se generan cintas cuyos bordes son escalonados (figura 1.9 (c)); mientras que en el segundo, el cual difiere en 30° del anterior, son de tipo zigzag tal como su nombre lo indica (figura 1.9 (b)). Ambas cintas presentan simetría de invarianza traslacional en la dirección del eje de las mismas. Podemos definir entonces una nueva celda unidad formada por un segmento de idéntico ancho

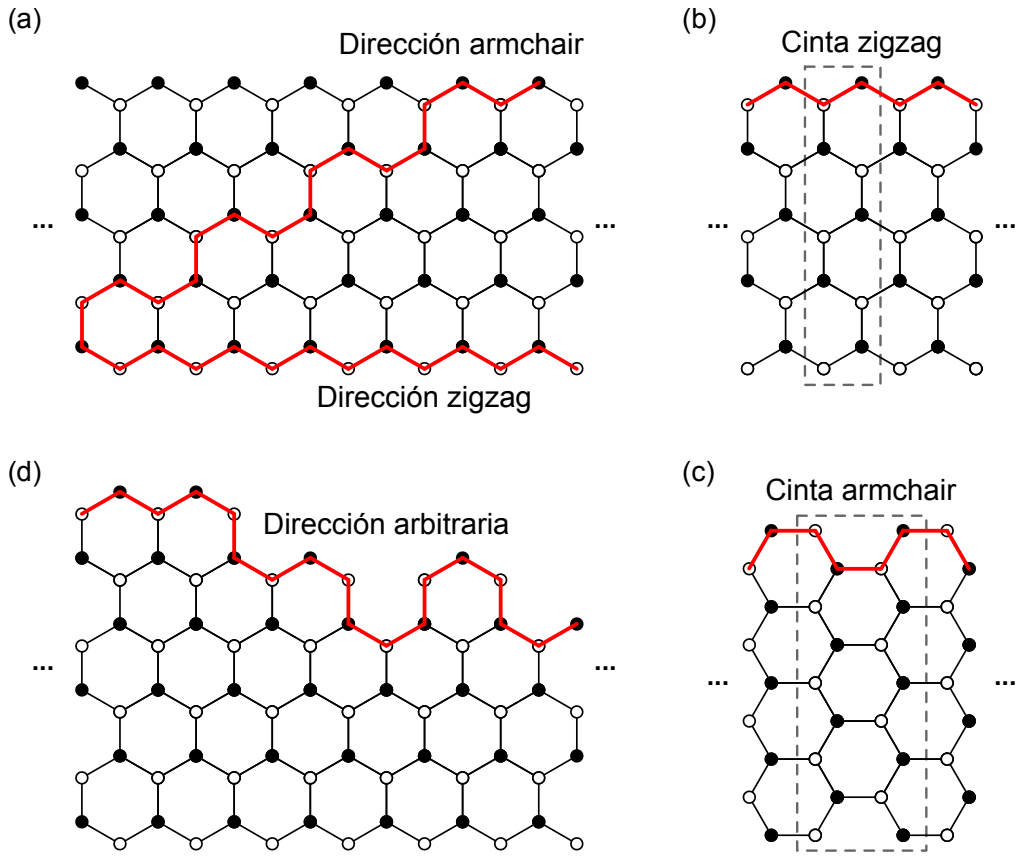


Figura 1.9: (a) Esquema del grafeno donde se muestran, en rojo, las direcciones armchair y zigzag. Cintas de grafeno de borde zigzag y armchair (resaltados en rojo) se presentan en (b) y (c), respectivamente. Las celdas unidad están indicadas, en cada caso, con rectángulos punteados. (d) Cinta de grafeno con un borde arbitrario resaltado en rojo, formado por segmentos armchair y zigzag. *Figura adaptada de [6].*

que la cinta (rectángulos punteados en las figuras 1.9 (b) y (c)). Por otra parte, existen formas más complejas de bordes que están compuestas básicamente por tramos armchair y zigzag de distinta extensión combinados (figura 1.9 (d)). Éstos se generan a partir de cortes en direcciones arbitrarias y son comúnmente obtenidos en muestras reales donde cintas con bordes controlados con precisión atómica son más difíciles de producir.

Las propiedades electrónicas y la estructura de bandas del grafeno pueden verse modificadas cuando, en lugar de la hoja bidimensional, consideramos una cinta de ancho finito. En primer lugar, siempre que los bordes sean regulares, sólo hay una dirección en la cual el sistema presenta invarianza traslacional. Es por esto que se reduce la dimensión del vector de onda $\boldsymbol{k}$, siendo ahora de una única componente. Las relaciones de dispersión de las cintas se pueden obtener entonces plegando la estructura de bandas del grafeno (figura 1.8) alrededor de la nueva zona de Brillouin del sistema, colapsando así el espectro sobre un único eje [6].

Dos características fundamentales de las cintas de grafeno determinan las propiedades electrónicas de las mismas: el tipo de borde y el ancho [91]. Las figuras 1.10 (a)

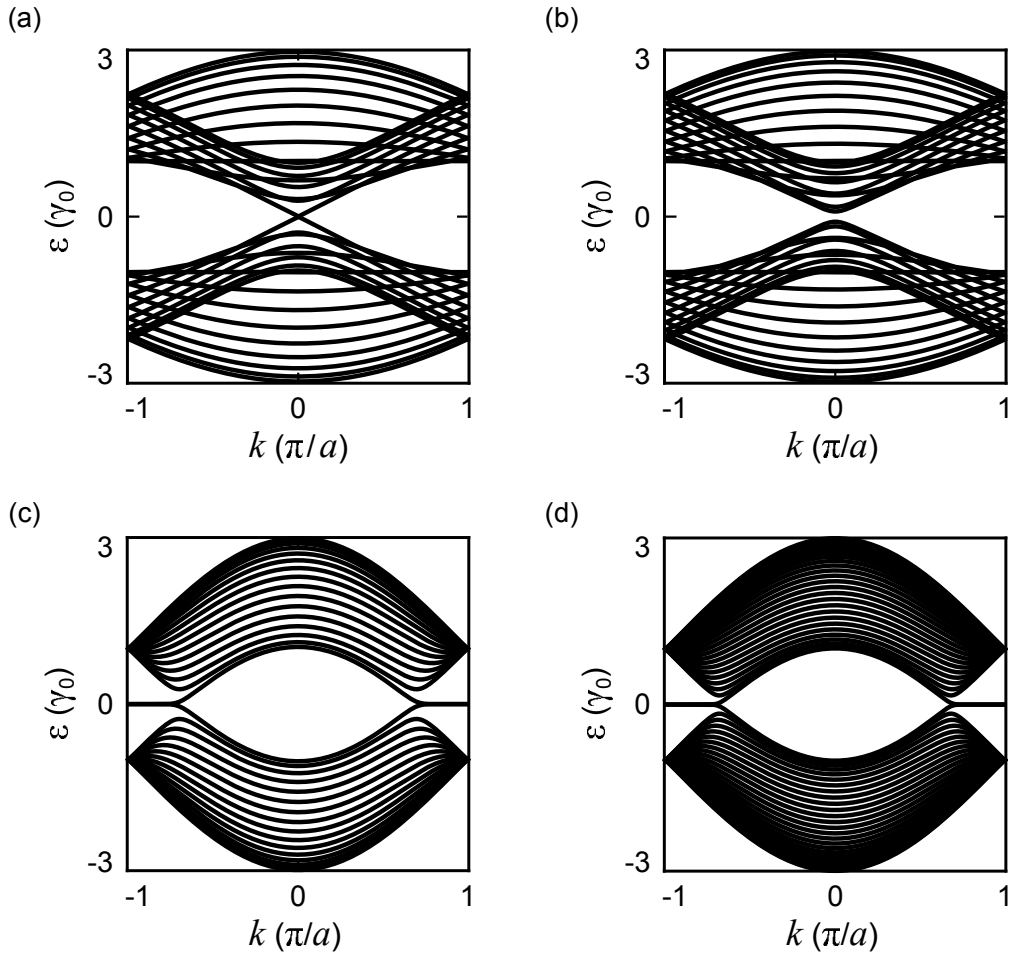


Figura 1.10: Estructura electrónica de una cinta de grafeno con bordes tipo armchair de ancho (a) 1,968 nm y (b) 2,214 nm. Las figuras (c) y (d) corresponden a muestras con bordes zigzag de ancho 3,266 nm y 5,609 nm, respectivamente. *Figura adaptada de [90].*

y (b) muestran la estructura electrónica de cintas de grafeno armchair de ancho 1,968 nm y 2,214 nm, respectivamente. Podemos notar en este caso que los vértices de los conos de Dirac del grafeno (K y K') colapsan en un único valor de k (específicamente, en $k = 0$). Además, es interesante destacar que, mientras la primera de las cintas mantiene una relación de dispersión relativista a bajas energías, en la de mayor ancho se observa la presencia de un gap en la estructura de bandas (figura 1.10 (b)). Esta apertura y cierre de gap se repite de manera periódica en función del ancho neto de la muestra (determinado a partir del número de líneas de dímero contadas de manera transversal al eje de la cinta).

La estructura electrónica de las cintas de grafeno con bordes zigzag se muestra en la figura 1.10 (c) y (d), para muestras de ancho 3,266 nm y 5,609 nm, respectivamente. A diferencia de las cintas armchair, en este caso se observa la presencia de ambos conos de Dirac en la relación de dispersión (localizados en valores opuestos de k). Las cintas zigzag conservan el carácter semimetálico del grafeno independientemente del ancho de las mismas. Sin embargo, debido al confinamiento en la dirección

transversal, emergen estados de borde localizados que se manifiestan como bandas planas a la energía de Fermi que unen los valles K y K'.

Por lo tanto, debido a la cuasi unidimensionalidad, la estructura electrónica de la cinta de grafeno resulta diferente a la del material bulk bidimensional. Más aún, en función del tipo de borde (armchair, zigzag o un borde arbitrario) y del ancho de la muestra, el sistema presenta carácter semimetálico (como la hoja de grafeno) o semiconductor, abriendo un gap alrededor del punto de Dirac en la relación de dispersión [6, 91].

1.2. Aislantes topológicos

En las últimas décadas, las ciencias física y matemática han encontrado un nuevo punto de conexión en el área de los aislantes topológicos [15, 16]. Hasta 1980, las propiedades eléctricas de la materia podían ser descriptas empleando la teoría de bandas, ampliamente utilizada en la física de la materia condensada. De esta manera se clasificaba a los sistemas en aislantes comunes (triviales), semiconductores y metales, según si presentan o no un gap en la estructura electrónica [78]. Sin embargo, en 1980 Klaus von Klitzing descubrió el primer caso de un material que presentaba propiedades inexplicables hasta el momento, el cual se denomina actualmente como aislante topológico [14].

Los aislantes topológicos surgen como una nueva fase electrónica de la materia. La misma está caracterizada por la ausencia de conducción eléctrica en el bulk (de allí su nombre de aislante) y por la presencia de estados metálicos que transportan corriente en los bordes o caras expuestas. Los estados metálicos se encuentran protegidos por simetrías propias del sistema como pueden ser de inversión, reversión temporal y de quiralidad, entre otras [15, 16]. Esta protección hace que la conducción eléctrica sea sumamente robusta frente a desorden o fallas de la muestra, una característica que es de sumo interés para posibles aplicaciones en la industria. Las propiedades eléctricas y de robustez de estos materiales pueden ser explicadas a partir de su carácter topológico, el cual queda determinado mediante el cálculo de un invariante matemático [92-94]. Es por esto que, en la actualidad, el orden topológico de los sistemas se incorporó a la teoría de bandas [92].

El punto de inicio en el desarrollo de esta nueva rama de la física fue experimental a través de la medición del efecto Hall cuántico entero en gases de electrones bidimensionales [14]. La conexión teórica con la topología matemática, y el bautismo del área como materiales aislantes topológicos, es de hecho más reciente en el tiempo. Sin embargo, fue a partir de ésta que se pudieron justificar muchos de los resultados experimentales previamente obtenidos, así como realizar nuevas predicciones que expanden el área de estudio, interés y aplicación de los aislantes topológicos [15, 16, 95].

1.2.1. Efecto Hall cuántico entero

Klaus von Klitzing estaba estudiando transistores de efecto campo formados por capas de metal-óxido-semiconductor (MOSFET), cuando descubrió que los electrones en la capa semiconductora de silicio se comportaban como un gas de electrones libres bidimensional [14]. Este comportamiento era idéntico al observado en un metal pero confinado en dos dimensiones. Según la teoría de bandas, los electrones en los metales pueden moverse libremente a través de la banda de conducción. De esta manera, al someter una muestra a una diferencia de potencial entre dos cables adheridos a sus extremos, se genera una corriente electrónica neta. Este mismo resultado observó en su investigación von Klitzing para los electrones que formaban el gas bidimensional en la capa semiconductora de los transistores.

Un siglo antes, Edwin Hall había demostrado que, en una placa fina de metal donde circula una corriente eléctrica neta y que se encuentra en presencia de un campo magnético externo ortogonal a la misma, se origina una diferencia de potencial perpendicular a la corriente y al campo (figura 1.11) [96]. Este voltaje se genera como consecuencia del accionar de la fuerza de Lorentz a la cual están sometidos los portadores de carga por la presencia del campo magnético. Actualmente este resultado se conoce como el efecto Hall clásico y la resistencia a la corriente eléctrica asociada a esta diferencia de potencial (y su correspondiente conductancia) se denomina resistencia Hall.

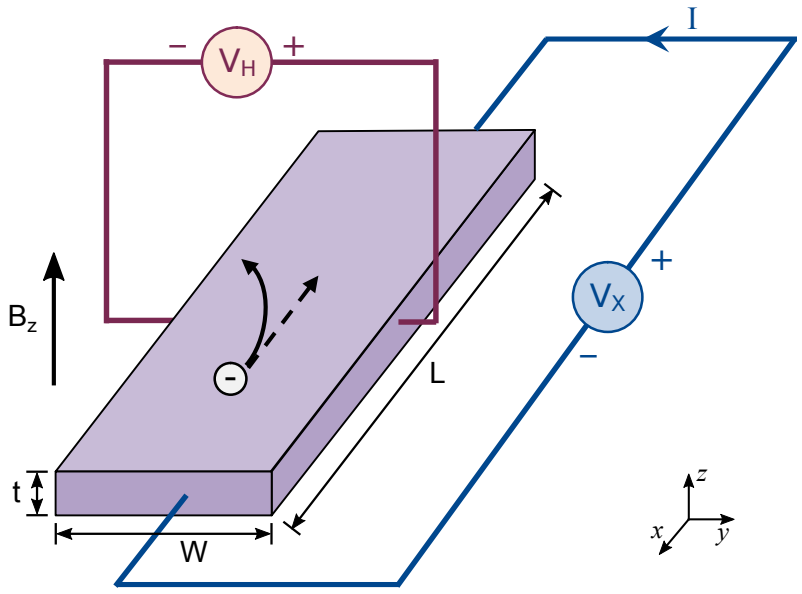


Figura 1.11: Esquema del dispositivo experimental empleado para la medición del efecto Hall clásico. Se muestra el cambio en la trayectoria de un electrón por la presencia del campo magnético externo ($\mathbf{B}_z$) ortogonal a la muestra.

En el caso del gas de electrones bidimensional, al colocar la muestra en un campo magnético intenso (y a bajas temperaturas, alrededor de 4 K) también se observó la aparición de una resistencia Hall. Sin embargo, existe una diferencia sustancial: esta

resistencia se encuentra cuantizada en números enteros de h/e^2 [14]. Es por esto que recibe el nombre de efecto Hall cuántico entero (QHE por sus siglas en inglés).

La cuantización de la resistencia en el gas de electrones bidimensional en presencia de un campo magnético se debe, en primer lugar, al confinamiento de los portadores de carga en tan sólo dos dimensiones. Estos electrones describen órbitas ciclotrónicas circulares cuya frecuencia depende directamente de la intensidad del campo magnético (figura 1.12). En ausencia de una diferencia de potencial entre los extremos de la muestra, no existe un movimiento neto de los electrones. Por otra parte, debido a que las partículas pueden ser descriptas mecanocuánticamente, las órbitas están cuantizadas y las energías permitidas corresponden a niveles altamente degenerados conocidos como niveles de Landau [97, 98].

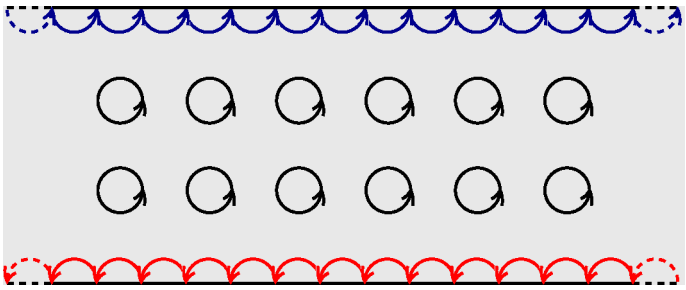


Figura 1.12: Esquema de un gas de electrones bidimensional en el régimen Hall cuántico entero, en el cual el movimiento de los electrones está representado con flechas. *Figura adaptada del curso "Topología en materia condensada" (TU Delft).*

Si consideramos una muestra de gas de electrones bidimensional finita (es decir, donde el material presenta bordes), el comportamiento de los electrones en el centro del sistema difiere del de aquellos que se encuentran próximos al límite. Si bien en ambos casos las órbitas ciclotrónicas tienen la misma frecuencia, los electrones próximos al borde de la muestra no pueden completar una órbita (ya que deberían "salir" por fuera de ésta). Por lo tanto se generan "skipping orbits": al llegar al límite de la muestra, el electrón comienza una nueva órbita en lugar de concluir el movimiento circular anterior (figura 1.12) [15]. Como resultado, los electrones que se encuentran próximos al borde del material presentan un movimiento neto cuya dirección y sentido depende del borde del material en el que se encuentren [98].

Debido al carácter aislante del bulk del material y la direccionalidad del movimiento de los electrones por los bordes, no es posible entonces que haya backscattering (o retrodispersión) [99]. El backscattering es la reflexión de los portadores de carga en un ángulo de 180°, de manera tal que los mismos regresan a donde partieron. Es por esto que la conducción eléctrica en el gas de electrones bidimensional bajo la acción de un campo magnético externo es sumamente robusta, y aun en presencia de defectos y desorden (como vacancias de átomos), la misma se mantiene constante. Esta característica es de gran interés para aplicaciones en la industria electrónica donde la pérdida, la interferencia y el ruido de las señales es un problema.

En 1980, cuando von Klitzing estudió por primera vez el gas de electrones bidimensional en presencia de un campo magnético [14], la teoría de los aislantes topológicos no había sido aún desarrollada. Sin embargo, actualmente, sabemos que este experimento resultó ser la puerta de entrada a la familia de los aislantes topológicos: materiales que son aislantes en el bulk, pero que tienen una conducción eléctrica no nula por los bordes.

Efecto Hall cuántico en grafeno

Al ser el grafeno un material bidimensional en el cual sus electrones se mueven libremente en el plano, es de esperar que en presencia de un campo magnético externo también se observe el efecto Hall cuántico entero. En el año 2005, el grupo de Novoselov y Geim publicó los primeros resultados experimentales de magneto-transporte en una hoja de grafeno [23]. Específicamente, mostraron la existencia de plateaus en la resistencia Hall junto con la correspondiente cuantización de energía en los niveles de Landau [25, 100, 101].

Una de las principales, y más celebradas, diferencias del efecto Hall cuántico en grafeno es la cuantización semientera de la conductancia en unidades de $4e^2/h$ [23, 24]. Este factor 4 proviene de la particular estructura electrónica del grafeno (presenta simetría electrón-hueco y portadores de carga de masa nula alrededor de la energía de Fermi) que se refleja en una doble degeneración de spin y de valle [23]. En las figuras 1.13 (a) y (b) se presentan los espectros electrónicos de una cinta de grafeno zigzag en ausencia y presencia de un campo magnético externo donde se observa la formación de niveles de Landau.

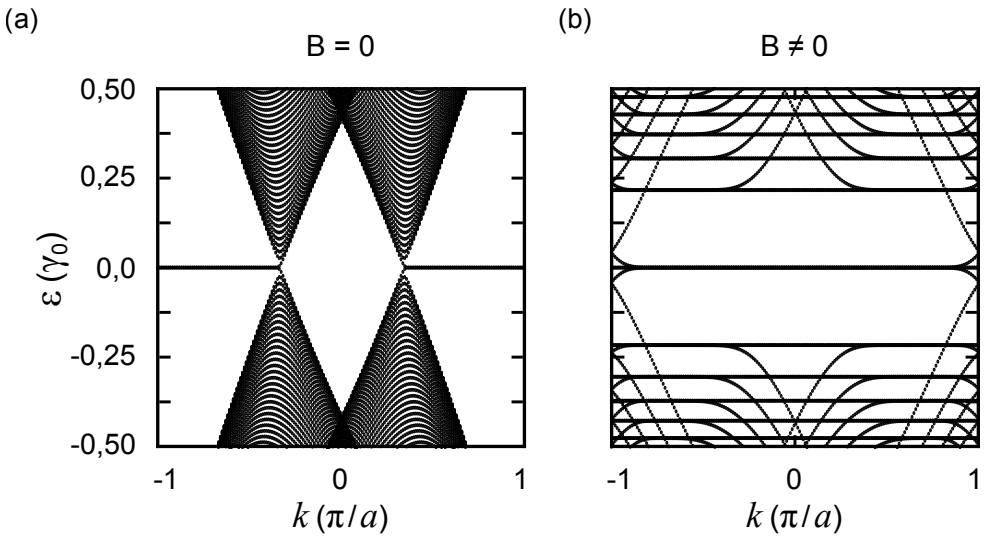


Figura 1.13: Estructura electrónica de una cinta de grafeno con bordes tipo zigzag, en (a) ausencia y (b) presencia de un campo magnético externo perpendicular a la misma. Cuando $B \neq 0$ el sistema se encuentra en el régimen Hall cuántico entero y se observan en la figura los niveles de Landau correspondientes.

Las energías ciclotrónicas obtenidas para el efecto Hall cuántico en grafeno son inusualmente altas. Es por esto que que es posible observar el mismo aún a temperatura ambiente [102], a diferencia de semiconductores tradicionales donde los experimentos deben realizarse a bajas temperaturas. Debido a esta característica propia del grafeno, y a la alta precisión y robustez de la cuantización de la energía en el efecto Hall cuántico, hoy se utiliza la medición de este efecto en grafeno para definir la constante de resistencia de von Klitzing (h/e^2) en metrología [103].

1.2.2. Thouless y los invariantes topológicos

La primera explicación teórica del efecto Hall cuántico entero fue formulada en 1982 por David J. Thouless [92], un par de años después de su descubrimiento experimental, basándose en un argumento previo de Robert B. Laughlin [104]. Específicamente, plantea que la conductancia Hall es proporcional a la integral sobre la celda unidad en el espacio recíproco de un integrando que involucra las derivadas de la función de onda. El resultado final es consistente con lo observado experimentalmente: la conductancia está cuantizada en unidades enteras de e^2/h.

Si bien en el trabajo no se mencionan argumentos topológicos, el cálculo presentado y la conclusión asociada pueden interpretarse a partir de dicha rama de la ciencia. En topología matemática es posible clasificar a los objetos según un dado invariante, es decir, una propiedad que no varía frente a deformaciones reversibles de los mismos [105]. Un ejemplo típico de invariante es el número de agujeros en un material: es posible deformar una esfera reversiblemente hasta convertirla en un vaso (0 agujeros), pero para obtener una taza es necesario crear un agujero (el de la asa), por lo que la esfera y la taza pertenecen a dos grupos topológicos diferentes (figura 1.14). Análogamente, la taza se puede deformar hasta obtener una dona pero no un par de anteojos (tiene dos agujeros).

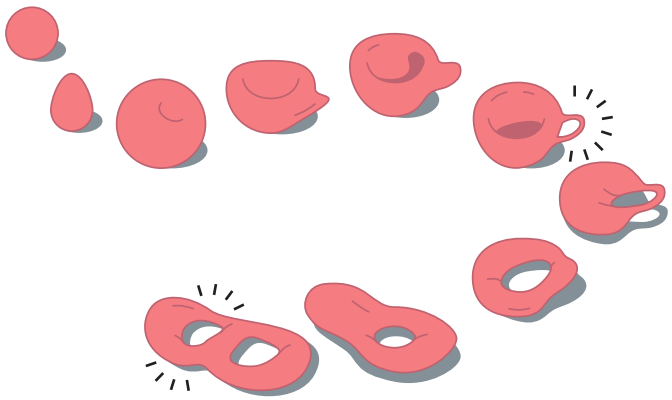


Figura 1.14: Esquema de la deformación no reversible de una esfera para llegar a un par de anteojos. Ambos objetos pertenecen a dos grupos topológicos diferentes, descriptos por el número de agujeros. *Figura adaptada de [18].*

Esta idea puede ser extendida a la física [18] donde, por ejemplo, la estructura de bandas de un aislante (material cuya energía de Fermi reside en el centro de un gap) puede deformarse reversiblemente hasta obtener el vacío (banda de conducción infinitamente separada de la de valencia). De esta manera, el aislante y el vacío pertenecen a igual categoría topológica y por ende sus propiedades referidas a la misma son equivalentes. Es posible entonces emplear las nociones de la topología para distinguir aislantes triviales (como los antes mencionados), de los topológicos, por ejemplo el gas de electrones bidimensional o grafeno en presencia de un campo magnético externo.

Los invariantes topológicos comúnmente empleados en física cuentan, en lugar del número de agujeros de un objeto, el número de "nudos" en la función de onda del material bajo estudio [106]. Para ello se calcula la integral en la zona de Brillouin de una función que involucra el cambio de las funciones de onda $\psi(\boldsymbol{k})$ con el vector de onda $\boldsymbol{k}$ [93, 94, 106, 107]. Esta integral está bien definida en un gap de la estructura electrónica, donde las bandas están completamente llenas o vacías. Esta ecuación es análoga a la presentada por Thouless en 1982 para explicar el efecto Hall cuántico en el gas de electrones bidimensional [92]. Los invariantes topológicos son entonces una medida no-local (involucra la función de onda en el espacio de momento) que caracteriza al bulk del material.

Correspondencia bulk-borde

Debido a que el invariante topológico adquiere valores discretos, el mismo no está bien definido en la interfaz entre dos aislantes que exhiban diferente valor. En términos físicos esto implica que, en la frontera entre ambos aislantes, el material se comporta como metálico (sistema sin gap en la estructura electrónica donde el invariante no está bien definido). Los estados conductores que surgen en la interfaz se denominan estados de borde topológicos.

La principal diferencia entre un estado de borde debido a electrones localizados en los sitios más externos de la muestra y los topológicos se encuentra en la robustez frente a los defectos y al desorden del sistema. Los estados de borde topológicos se originan por la diferencia en el orden topológico de los materiales adyancentes, una propiedad del bulk [106]. Es por esto que no dependen de los detalles atómicos de la interfaz y no pueden ser destruidos por perturbaciones locales en el borde (como funcionalización o fallas). Por el contrario, los estados que se forman por la existencia de una frontera e independientemente del orden topológico de los materiales, pueden ser fácilmente modificados o eliminados. Esta característica de los aislantes topológicos es importante entre otros motivos porque, para definir una fase de la materia como diferente de otra, las propiedades no deben destruirse por pequeñas perturbaciones.

La existencia de los estados de borde topológicos en un material también se ve reflejada en la conductancia Hall. Ésta está directamente relacionada al número de dichos estados a través del invariante topológico [15, 16], y hereda por ende la

robustez frente a perturbaciones como desorden o interacciones entre partículas. De hecho, los estados de borde topológicos son los responsables de la cuantización de la conductancia en el efecto Hall cuántico entero del gas de electrones bidimensionales bajo la acción de un campo magnético externo (aislante topológico en contacto con el vacío, aislante trivial) [15].

Por lo tanto, los detalles atomísticos de una muestra son irrelevantes cuando se trata de estados provenientes de la interacción entre dos materiales de diferente orden topológico. El bulk determina lo que sucede en la frontera de los mismos: si hay estados de borde y en cuyo caso cuántos son. Este resultado es el que se conoce como correspondencia bulk-borde [106].

1.2.3. Modelo de Haldane

Una pregunta clave que surgió posteriormente al descubrimiento del efecto Hall cuántico entero (QHE) es si resulta necesario emplear un campo magnético externo para obtener un aislante topológico como el medido en el gas de electrones bidimensional. Es por esto que, la gran importancia del desarrollo teórico de Thouless [92] y otros científicos contemporáneos, fue el hallazgo de un método para obtener una conductancia Hall cuantizada aun en ausencia de una perturbación externa [18]. Así, en 1988, F. Duncan Haldane corroboró esta predicción a través de un modelo teórico, demostrando que los únicos requisitos necesarios para observar el QHE en un material eran romper la invarianza de reversión temporal y tener una banda de energía con un invariante topológico no nulo [108].

El modelo de Haldane es un modelo tight-binding de fermiones en una red hexagonal idéntica a la de grafeno donde no sólo se consideran términos de hopping a primeros vecinos sino también a segundos (entre sitios de tipo A o de tipo B, figura 1.15) [108]. Si bien la característica principal de este modelo es la ausencia de una perturbación externa, los elementos de matriz de hopping a segundos vecinos son complejos al igual que en un sistema teórico donde se incorpora un campo magnético. La diferencia está dada entonces por las fases de dichos hoppings, las cuales en el modelo de Haldane presentan signos alternados de manera tal que el flujo neto sea nulo en cada celda unidad. Estos términos rompen la simetría de reversión temporal, lo mismo que origina el campo magnético en el experimento de von Klitzing [14]. Haldane demostró mediante el cálculo del invariante topológico que, según la fase y el valor neto de los acoplamientos complejos, es posible obtener una fase tipo Hall cuántica entera.

La estructura electrónica calculada para el modelo de Haldane cuando los hoppings a segundos vecinos son nulos es idéntica a la del grafeno (figura 1.8). En ambos casos presentan puntos en la zona de Brillouin donde las bandas de conducción y de valencia se solapan, los cuales tienen su origen en la existencia de simetría de reversión temporal y de inversión en el sistema [106]. Cuando esta última se quiebra (las energías de los sitios tipo A difieren de la de los sitios tipo B), se abre un gap y el sistema se transforma en un semiconductor trivial. Por el contrario,

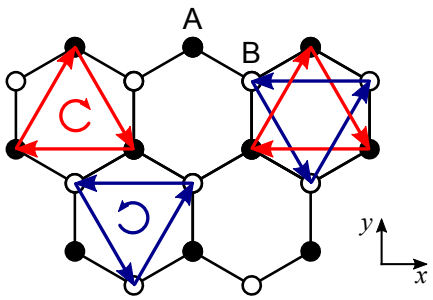


Figura 1.15: Esquema del modelo de Haldane, semejante al grafeno, con sitios de tipo A y B (marcados en negro y blanco, respectivamente). Los acoplamientos complejos a segundos vecinos se indican en flechas rojas y azules según el signo de la fase.

si la ruptura es sobre la simetría de reversión temporal, se obtiene un aislante en fase tipo Hall cuántica. En el caso de que ambas ocurran al mismo tiempo, la fuerza relativa determinará el tipo de estado en el que se encuentre el sistema finalmente. Todas estas combinaciones fueron resumidas por Haldane en un diagrama de fases mediante el cálculo teórico del invariante correspondiente [108].

El invariante topológico determinado para el modelo de Haldane es indicador de la cuantización de la conductancia Hall en el límite de campo magnético externo nulo (corresponde a un múltiplo entero de e^2/h). Además, los estados asociados a la fase tipo Hall cuántica están protegidos por las simetrías propias del sistema, siendo robustos frente a perturbaciones externas o desorden del sistema. Es por esto que el modelo teórico desarrollado por Haldane corresponde a un aislante topológico, y actualmente se conoce como aislante de Chern [18, 106].

Medición experimental

En el cierre del artículo donde Haldane propuso el modelo de aislante topológico en ausencia de un campo magnético externo [108], enunció: "*While the particular model presented here is unlikely to be directly physically realizable, it indicates that, at least in principle, the QHE can be placed in the wider context of phenomena associated with broken time-reversal invariance (...)*" ("Mientras que el particular modelo presentado aquí es improbable que sea directamente realizado físicamente, este indica que, al menos en principio, el QHE puede ser colocado en un contexto más amplio de fenómenos asociados con la ruptura de la invarianza de reversión temporal (...)"). Sin embargo, en 2013, esta fase de la materia fue observada en films finos de telururo de bismuto y antimonio ($(Bi,Sb)_2Te_3$) dopados con cromo a campo magnético nulo [109], lo que fue la primera detección experimental de un aislante de Chern.

Más aun, a lo largo del cuarto de siglo posterior a la predicción teórica de Haldane, nuevas técnicas experimentales fueron desarrolladas permitiendo la creación de un estado artificial de la materia que representa exactamente la "improbable realización" del modelo. En el año 2014, el grupo lideardo por Tilman Esslinger llevó a cabo la

primera determinación experimental de este modelo utilizando átomos fermiónicos ultrafríos en una red óptica tipo panal de abeja modulada periódicamente [110]. En la misma se caracterizó la estructura de bandas midiendo la curvatura de Berry, una propiedad que al igual que el invariante da cuenta de la topología del sistema [93]. Se determinó entonces la existencia de una fase tipo Hall cuántica entera, tal como lo predicho en el modelo de Haldane [108], en la cual se observó una corriente perpendicular de tipo Hall. Los resultados experimentales presentados son análogos a los predichos por Haldane, incluidos el diagrama de fases y los invariantes topológicos asociados.

1.2.4. Modelo de Kane – Mele: efecto Hall cuántico de spin (QSH)

El grafeno es un semimetal o un semiconductor de gap nulo, por lo que para convertirlo en un aislante topológico es necesario abrir en primer lugar un gap en la estructura electrónica a la energía de Fermi [6]. De manera análoga al modelo de Haldane [108], si colocamos una muestra sobre un potencial de compuerta de manera tal que la energía de los sitios A y B sea distinta, se rompe la simetría de inversión y la fase que se obtiene es trivial. En cambio, frente a un campo magnético externo que quiebra la simetría de reversión temporal, la fase que se obtiene es topológica y corresponde al efecto Hall cuántico. En el año 2005 Charles L. Kane y Eugene J. Mele demostraron que es posible transformar al grafeno en un aislante topológico aun en ausencia de un campo magnético externo [111].

El modelo propuesto por Kane y Mele [111] es en gran medida equivalente al de Haldane [108], con la diferencia de que considera la componente de spin de los electrones. Éste puede describirse como dos copias superpuestas del modelo de Haldane (una por cada spin $s_z = \pm 1/2$) con quiralidad opuesta del efecto Hall cuántico entero (observada por ejemplo en la dirección de propagación de los estados de borde) [106]. La quiralidad está dada por la fase del término de hopping complejo a segundos vecinos, que introduce un campo magnético efectivo periódico pero sin flujo neto. De esta manera se quiebra la simetría de reversión temporal para cada componente de spin por separado. Si bien en el modelo de Haldane dicho término era un artificio teórico, en el caso del modelo de Kane - Mele se puede interpretar como el efecto del acoplamiento spin - órbita de los electrones en el grafeno.

Si consideramos cada componente de spin por separado, podemos pensar al sistema como un aislante topológico en una fase de tipo Hall [111]. Por lo tanto tenemos estados de borde topológicos que se propagan en una dirección dada y que son robustos frente al desorden y defectos del sistema [15]. En el modelo de Kane - Mele, ambos spins tienen quiralidad del QHE opuesta, por lo que la dirección de propagación de los electrones en un dado borde del material es también opuesta. Entonces, un campo eléctrico aplicado a los extremos de la muestra inducirá corrientes en bordes opuestos para cada spin. Si bien no se obtiene una corriente perpendicular de carga neta, sí se genera una corriente de spin caracterizada por

una conductancia Hall de spin (figura 1.16). Este resultado es el que se conoce como efecto spin Hall cuántico (QSHE). [15, 16, 111]

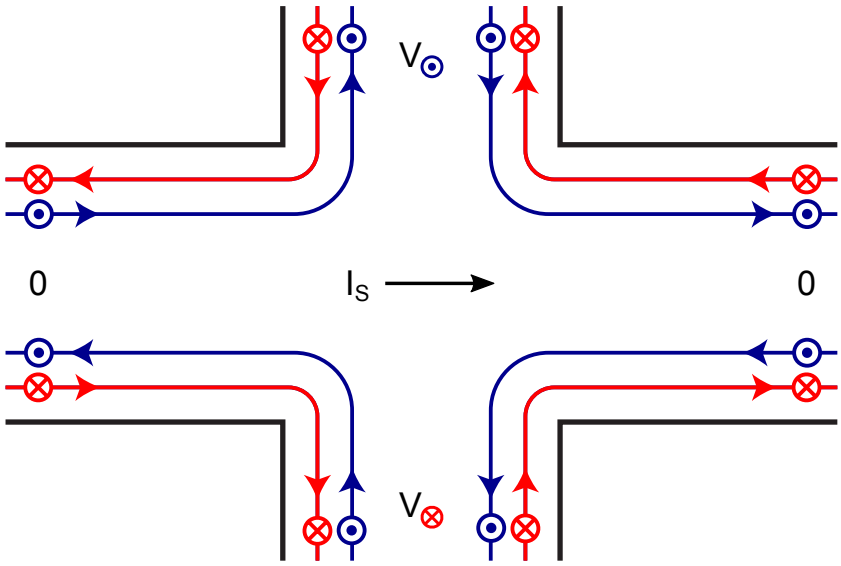


Figura 1.16: Esquema de un dispositivo de cuatro terminales en el régimen spin Hall cuántico. Los estados de borde disponibles para cada componente de spin se indican en rojo y azul. *Figura adaptada de [111].*

La estructura electrónica de una cinta de grafeno zigzag en una fase tipo QSH presenta dos bandas que atraviesan el gap de energía y conectan los puntos K y K'. Éstas corresponden a cada uno de los estados topológicos localizados en los bordes de la cinta. Sin embargo, a diferencia del modelo de Haldane, ambas bandas están degeneradas ya que en cada borde coexisten dos estados de distinto spin, que se propagan en dirección opuesta (figura 1.16) [15, 111]. La presencia de más de un estado en un mismo borde es responsable de que, aun cuando por su carácter topológico estos estados deben ser robustos, no lo sean frente a perturbaciones de tipo magnéticas que pueden mezclar estados con diferente spin.

Kane y Mele demostraron que el invariante topológico matemático correspondiente a su modelo sólo puede tomar dos valores posibles: 0 y 1 [112]. Es decir, el sistema presenta un orden topológico de tipo $\mathbb{Z}_2$, asociado a una fase trivial (0) y una topológica (QSH, 1). En este último caso, el invariante no está directamente relacionado con la conductancia del sistema como ocurre en el efecto Hall cuántico entero, lo cual se debe a la ausencia de una diferencia de carga neta perpendicular a la corriente. Sin embargo, en esta fase sí existe una acumulación de spin no nula, y es en alusión a ésta, a su carácter cuántico y a su semejanza con el QHE que el efecto recibe el nombre de spin Hall cuántico.

Medición experimental

En el año 2007, el grupo liderado por Laurens W. Molenkamp y Shou-Cheng Zhang presentó la primera determinación experimental de un aislante topológico intrínseco en el cual no es necesaria la aplicación de un campo magnético externo para obtener una fase no trivial [113]. El sistema estudiado fue un pozo cuántico de telururo de mercurio (HgTe) encerrado entre capas de telururo de cadmio (CdTe). A medida que el grosor de la capa de HgTe disminuye, el sistema pasa de un estado aislante trivial a una fase tipo spin Hall cuántica. Esto se determinó mediante la medición de la conductancia cuando la energía de Fermi se encuentra en el gap de energía del pozo cuántico, y se corroboró con experimentos de magnetorresistencia. La existencia de la fase QSH en el pozo cuántico de HgTe/CdTe se debe al fuerte acoplamiento spin-órbita que ocurre naturalmente en los compuestos formados por átomos pesados.

1.2.5. Sistemas forzados periódicamente

Una pregunta recurrente que surge al estudiar los aislantes topológicos es si es posible conferirle estas propiedades a cualquier material bidimensional (como puede ser un metal o un semiconductor trivial). El efecto Hall cuántico entero es un ejemplo de esta transformación, en el cual el orden topológico de un gas de electrones bidimensional en presencia y ausencia de un campo magnético externo es diferente [14, 15, 106]. Este efecto se observa también en grafeno, donde al aplicarse un campo magnético no nulo, experimenta una fase tipo Hall topológica [102].

Estudios recientes indican que también se puede abrir un gap energético en la estructura electrónica (transformar el material en aislante) y obtener fases topológicas no triviales cuando el sistema es forzado periódicamente. Un ejemplo es el caso de muestras sujetas a un potencial de compuerta periódico, a partir del cual es posible generar bombeo cuántico (como el propuesto por Thouless [114]) con propiedades topológicas [115]. Una segunda opción es colocar el sistema bajo la acción de un campo eléctrico, como puede ser irradiando la muestra con luz láser [116-119].

En los últimos años, el estudio teórico de sistemas forzados periódicamente con propiedades topológicas presentó un gran crecimiento. Esto se debe a la relativa facilidad con que pueden ser modelados utilizando la teoría de Floquet [120]. La misma corresponde al análogo temporal de la teoría de Bloch [81] en el espacio real, la cual permite determinar las funciones de onda y las energías permitidas de un sistema dependiente del tiempo. Al igual que con cualquier otro material, también es posible determinar un invariante topológico y clasificarlo según su orden topológico. Aquellos sistemas descriptos por la teoría de Floquet y que presentan propiedades no triviales se conocen actualmente como aislantes topológicos de Floquet [118, 121-125]

Los estados topológicos de Floquet pueden generarse en muestras de grafeno [116, 117, 119, 126], aislantes triviales [118], superconductores [127], o aun en

aislantes ya topológicos [128]. Experimentalmente, tanto la apertura de un gap en la estructura de bandas inducida por el láser, como los estados de Floquet-Bloch en la superficie de un aislante topológico, ya han sido observados [129, 130]. En los últimos tiempos nuevos experimentos [110, 131, 132] y teorías [119, 133-136] están siendo desarrollados con el fin de revelar las características propias de los estados topológicos y su física fuera del equilibrio [137, 138].

Grafeno irradiado con luz láser

El grafeno es un ejemplo de material que puede adquirir propiedades topológicas al irradiarlo con luz láser [116, 117, 119, 126]. Debido a su estructura electrónica característica, es necesario emplear luz polarizada circularmente para abrir gaps de energía [116, 139-142]. Utilizando la teoría de Floquet se mostró que en dichos gaps surgen estados de borde quirales propios de un material topológico. Dependiendo de la frecuencia de la radiación empleada, es posible que haya más de un par de estos estados en cada gap. Si bien se determinó la existencia de una conductancia Hall cuantizada, la misma no está necesariamente precisada por el número de estados topológicos (como sí ocurre en el efecto Hall cuántico entero) [143]. Esto se debe a que los estados dentro de cada gap se encuentran jerarquizados en función del orden de los procesos fotónicos asociados a cada uno [144], y sólo aquellos que contribuyen a la densidad de estados promediada en el tiempo colaboran con la conductancia Hall [143].

1.2.6. Modelo de Su-Schieffer-Heeger (SSH): aislante topológico unidimensional

En las secciones previas analizamos distintos ejemplos de aislantes topológicos bidimensionales (gas de electrones libres, grafeno, modelo de Haldane y modelo de Kane-Mele). Sin embargo, la bidimensionalidad no es una característica necesaria para que un material presente comportamiento topológico. De hecho, existen aislantes topológicos unidimensionales como por ejemplo el poliacetileno dimerizado, representado en el modelo de Su-Schieffer-Heeger (SSH) [145-147].

Contemporáneamente al nacimiento del efecto Hall cuántico entero [14, 92], en 1979, Wu-Pei Su, John R. Schrieffer (premio Nobel de física en 1972 por el desarrollo de la teoría BCS de superconductividad [148]) y Alan J. Heeger presentaron un estudio teórico sobre las propiedades de cadenas largas de poliacetileno [145]. En éste desarrollan el primer modelo teórico de un polímero conductor, área de la física y química de materiales que se desarrolló vertiginosamente a partir de ese momento. El posterior descubrimiento experimental de estos materiales le valió, en el año 2000, el premio Nobel de química a A. J. Heeger [149].

El modelo SSH del poliacetileno corresponde a una cadena de átomos de carbono dimerizada donde se alterna entre enlaces simples (enlace covalente tipo σ) y enlaces dobles (un enlace σ y uno π), figura 1.17 [145]. Al igual que para el grafeno, los

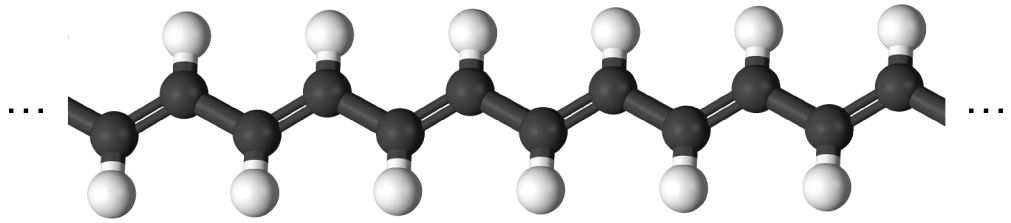


Figura 1.17: Esquema del modelo de Su-Schrieffer-Heeger del poliacetileno. *Figura adaptada del curso "Topología en materia condensada" (TU Delft).*

orbitales atómicos del carbono se encuentran hibridizados formando tres orbitales sp^2 (en este caso el tercer enlace covalente es con un átomo de hidrógeno) y un orbital p perpendicular al plano de la molécula [75]. Este orbital p_z, que presenta un único electrón por átomo, es el encargado de formar enlaces π con los sitios vecinos, generando las bandas π enlazantes y antienlazantes (próximas a la energía de Fermi). La celda unidad está formada entonces por dos átomos de carbono inequivalentes tipo A y B (figura 1.18), donde la constante de red (d) es igual al doble de la distancia entre sitios vecinos.

El Hamiltoniano del modelo SSH es paradigmático ya que puede exhibir estados de borde no-triviales, siendo así un ejemplo mínimo de un aislante topológico [146, 147]. El carácter topológico está dado por la fuerza relativa de los acoplamientos intra (γ_1) e inter (γ_2) celda, los cuales adquieren valores alternados (figura 1.18). La existencia, o ausencia, de los estados de borde y su topología puede determinarse teóricamente a partir del cálculo del invariante topológico correspondiente.

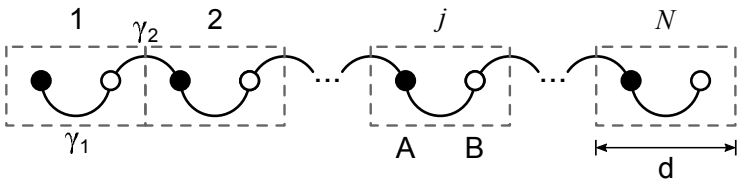


Figura 1.18: Esquema del modelo de Su-Schrieffer-Heeger con sitios de tipo A y B (marcados en negro y blanco, respectivamente). Se considera una sección finita del modelo formada por N celdas unidad de ancho d, y donde γ_1 y γ_2 representan los acoplamientos dentro y fuera de la celda unidad, respectivamente.

Modelo atomístico

El modelo de Su-Schrieffer-Heeger describe la dimerización que ocurre en un sistema unidimensional sujeto a una perturbación que duplica la periodicidad de la red (figura 1.18) [145]. Considerando la transición de Peierls que sufre este modelo [150, 151], y que las excitaciones a bajas energías están completamente descriptas por

las bandas π, podemos plantear el Hamiltoniano tight-binding de una única partícula:

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha,j} E_{\alpha,j}\, c^{\dagger}_{\alpha,j} c_{\alpha,j} - \sum_{j} \left(\gamma_1 c^{\dagger}_{A,j} c_{B,j} + \gamma_2 c^{\dagger}_{B,j-1} c_{A,j} + \text{c.h.}\right) \tag{1.9}$$

donde $c^{\dagger}_{\alpha,j}$ y $c_{\alpha,j}$ son los operadores de creación (aniquilación) en el sitio α (que puede ser de tipo A o B) de la j-ésima celda unidad. Las energías de sitio $E_{\alpha,j}$ pueden elegirse todas iguales a una energía de referencia (específicamente, se adoptan como energía cero). Los elementos de matriz de hopping γ_1 y γ_2 se definen como $\gamma_1 = \gamma_0 + \delta$ y $\gamma_2 = \gamma_0 - \delta$, con δ la fuerza de dimerización. El hopping γ_0 corresponde al presente en una cadena lineal en ausencia de una perturbación externa que dimerice la red, y se elige como la unidad de energía. La constante de red para la fase dimerizada es $d = 2a$, donde a es la distancia entre sitios vecinos. Por último, el término c.h. se refiere al Hermitiano conjugado de los dos sumandos anteriores.

En el límite bulk, podemos emplear el Teorema de Bloch [81] y escribir el Hamiltoniano de la ecuación 1.9 en su versión matricial, en la base de los sitios A y B, como:

$$\mathcal{H}(k) = \begin{pmatrix} E_A & -\gamma_1 - \gamma_2\, e^{-\mathrm{i}\,kd} \\ -\gamma_1 - \gamma_2\, e^{\mathrm{i}\,kd} & E_B \end{pmatrix} \tag{1.10}$$

asumiendo γ_1 y γ_2 reales. Esta expresión puede reducirse a $\mathcal{H}(k) = \mathbf{h}_k \cdot \boldsymbol{\sigma}$, donde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ es el vector de las matrices de Pauli. Debido a que, por definición, los sitios A y B presentan igual energía ($E_A = E_B = 0$), la componente z del vector $\mathbf{h}_k$ es nula. Esta característica da cuenta de la simetría quiral (o de subred) presente en el sistema, la cual asegura también la existencia de fases topológicas diferentes [152].

Estructura electrónica

La estructura de bandas del modelo SSH infinito puede obtenerse diagonalizando el Hamiltoniano tight-binding de Bloch de la ecuación 1.10 [78]. Fijando las energías de sitio iguales a la energía de referencia ($E_A = E_B = 0$), obtenemos:

$$\varepsilon(k) = \pm\sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2 + 2\,\gamma_1\gamma_2 \cos\left(kd\right)}$$

Reemplazando por las definiciones de los elementos de matriz de hopping intra e inter celda, la estructura electrónica queda determinada por:

$$\varepsilon(k) = \pm\sqrt{2\left(\gamma_0^2 + \delta^2\right) + 2\left(\gamma_0^2 - \delta^2\right)\cos\left(kd\right)} \tag{1.11}$$

En la figura 1.19 se presenta el espectro de energías de modelo SSH bulk obtenido a partir de la ecuación 1.11. Particularmente se muestran dos casos donde la perturbación que duplica las celdas del sistema se encuentra ausente ($\delta = 0$,

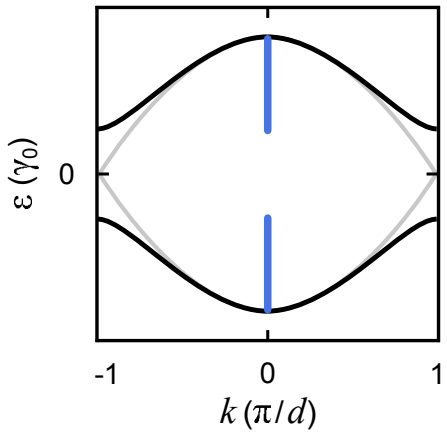


Figura 1.19: Estructura electrónica del modelo bulk de Su-Schrieffer-Heeger dimerizado (línea negra) o sin dimerizar (línea gris) espacialmente. Los estados electrónicos de una muestra finita del modelo SSH, donde no se puede definir un vector de onda, se presentan en azul.

línea gris) y presente ($\delta \neq 0$, línea negra). En primer lugar podemos notar que en ambos casos el espectro está compuesto por dos bandas, correspondientes a los orbitales moleculares π enlazante y antienlazante. Como cada sitio aporta un único electrón, ya que consideramos únicamente los orbitales atómicos p_z [75], la banda π enlazante se encuentra totalmente llena (por lo que se denomina de valencia) y la anti enlazante vacía (corresponde a la banda de conducción). La energía de Fermi se encuentra por lo tanto a la energía cero de referencia. Además, los espectros son simétricos respecto de esta energía, lo cual se debe a la simetría quiral propia del sistema (si $+\varepsilon$ es un autovalor entonces su opuesto $-\varepsilon$ también lo es) [152].

Por otra parte, en la figura 1.19 podemos notar que, cuando $\delta \neq 0$, se abre un gap en los puntos de neutralidad de carga de la estructura electrónica. La apertura del mismo se debe a la transición de Peierls que sufre el sistema por la existencia de la perturbación que dimeriza la red [150, 151]. La magnitud del gap puede calcularse a partir de la ecuación 1.11, siendo su valor igual a $\Delta_0 = 4|\delta|$. La apertura de este gap genera que el sistema no sólo pase de metálico a aislante, sino que pueda adquirir propiedades topológicas.

Si en lugar del modelo SSH infinito pensamos en una cadena de poliacetileno dimerizada de un número de átomos de carbono determinado, ya no podemos emplear el teorema de Bloch y definir un vector de onda. En este caso, en cambio, tenemos una serie de estados electrónicos de diferente energía permitidos. Cuando el sistema es lo suficientemente largo, el número de estados es tal que al graficarlo se observa como la estructura de bandas del bulk colapsada sobre un único punto en el eje de las abscisas (puntos azules en la figura 1.19).

Topología del modelo SSH: estados de borde y el invariante

Una primera conjetura acerca de las características topológicas del modelo SSH puede realizarse analizando la existencia de estados de borde en una cadena finita (considerando la correspondencia bulk-borde) [15, 16, 106]. Partiendo de la definición atomística del modelo, podemos distinguir dos fases diferentes: una donde $\delta > 0$ ($|\gamma_1/\gamma_2| > 1$) y la otra con $\delta < 0$ ($|\gamma_1/\gamma_2| < 1$). Los estados electrónicos permitidos en ambos casos, calculados a partir de la diagonalización del Hamiltoniano completo (al ser un sistema finito no es posible emplear el teorema de Bloch), se muestran en puntos azules y rojos en la figura 1.20 (a) y (b) respectivamente. Para una comparación más directa, también se presentan las estructuras de bandas del sistema bulk dimerizado (línea negra) y sin dimerizar (línea gris). La diferencia entre ambos gráficos radica en la existencia de dos estados electrónicos a energía cero, es decir dentro del gap del bulk, cuando $|\gamma_1/\gamma_2| < 1$ (puntos rojos en la figura 1.20 (b)). Estos estados se encuentran localizados en los extremos de la cadena, por lo que a priori podemos teorizar que corresponden a estados de borde topológicos del sistema.

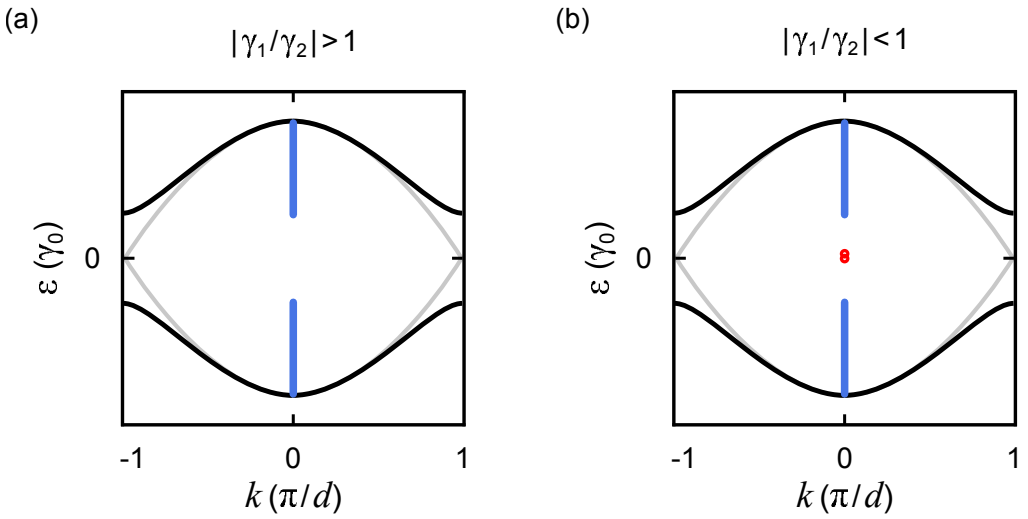


Figura 1.20: Estructura electrónica del modelo bulk de Su-Schrieffer-Heeger dimerizado (línea negra) o sin dimerizar (línea gris) espacialmente, cuya fase topológica nativa es (a) trivial y (b) no trivial. Los estados electrónicos de una muestra finita del modelo SSH, donde no se puede definir un vector de onda, se presentan en azul; y en particular, para el sistema topológico nativo, los estados de borde a energía cero se muestran en rojo.

Para confirmar la naturaleza topológica de los estados a energía cero, se recurre al cálculo del invariante matemático correspondiente. En un sistema unidimensional, el invariante relevante se conoce como fase de Zak ($\mathcal{Z}$) [107], el cual se define como:

$$\mathcal{Z} = i \oint dk \, \langle u_k | \partial_k u_k \rangle \tag{1.12}$$

donde $|u_k\rangle$ son los estados de Bloch periódicos del sistema. El cálculo de la fase involucra la integral sobre la zona de Brillouin de la derivada de la función de onda respecto al vector de onda (por lo que está bien definida únicamente en los gaps de energía). Esta definición es equivalente a la del invariante topológico determinado por Thouless [92] (sección 1.2.2). La fase de Zak puede interpretarse como la fase geométrica adquirida por el estado de Bloch asociado después de un ciclo adiabático en la zona de Brillouin (ciclo en el cual la variación es lenta comparada con las otras escalas temporales).

A partir del cálculo de los estados de Bloch ($\mathcal{H}_k|u_k\rangle = \varepsilon_k|u_k\rangle$, donde $\mathcal{H}_k$ está dado por la ecuación 1.10) podemos determinar el valor de la fase de Zak para cada banda del modelo SSH [107]. La suma de las fases de Zak para todas las bandas con energía por debajo de un dado gap indica la existencia (con la fase acumulada igual a π) o ausencia (fase acumulada nula) de estados de borde topológicos a la energía de la mitad del gap. Para el modelo SSH obtenemos que las fases de Zak de ambas bandas (valencia y conducción) son iguales a 0 y π cuando $|\gamma_1/\gamma_2| > 1$ y $|\gamma_1/\gamma_2| < 1$, respectivamente. De esta manera podemos deducir que si $|\gamma_1/\gamma_2| > 1$ el sistema es trivial y no presenta estados de borde; mientras que si $|\gamma_1/\gamma_2| < 1$, el sistema se encuentra en una fase topológica con estados de borde localizados a energía cero (mitad del gap, figura 1.20 (b)). Por lo tanto, el carácter topológico del modelo SSH está determinado por la relación entre los hoppings intra e inter celda. Las distintas fases han sido corroboradas experimentalmente en sistemas de materia fría simulando este modelo [153].

1.2.7. Aislantes topológicos tridimensionales

En la última década, el campo de los aislantes topológicos se ha extendido también hacia materiales tridimensionales [15, 152, 154]. En el año 2007, distintos grupos determinaron de manera teórica que el modelo para un aislante en una fase tipo spin Hall cuántica desarrollado por Kane y Mele (sección 1.2.4) [111] podía generalizarse en tres dimensiones [155-157]. La principal característica de estos materiales es la existencia de estados de conducción únicamente en las caras superficiales del material y su comportamiento como aislante en el bulk [152, 154].

El descubrimiento experimental del primer aislante topológico tridimensional ocurrió exactamente un año después en una muestra de $Bi_{(1-x)}Sb_x$ [158]. Posteriormente, una segunda generación de materiales 3D con carácter topológico fue desarrollada teórica y experimentalmente [159, 160]. Dentro de ella se incluye, por ejemplo, al seleniuro de bismuto (Bi_2Se_3) y al telururo de bismuto (Bi_2Te_3), materiales de interés en la investigación y la industria por la posible explotación de sus demás características [15].

A partir del desarrollo del área de aislantes topológicos tridimensionales, nuevos materiales con propiedades similares han sido propuestos teóricamente [161]. Entre ellos se encuentran los semimetales de Weyl o semimetales topológicos, los cuales fueron descubiertos experimentalmente en el año 2015 en muestras de arseniuro de

tantalio (TaAs) y bismuturo de sodio (Na_3Bi) [162-164]. Estos materiales corresponden al análogo electrónico del grafeno en tres dimensiones, donde los electrones se comportan como fermiones de masa nula [165]. Los mismos presentan propiedades topológicas no triviales, pero al ser semimetales (no tienen un gap en la estructura electrónica), no se clasifican como aislantes. De esta manera, los semimetales de Weyl vienen a extender la clasificación topológica hasta hoy conocida más allá de los aislantes topológicos [161].

1.3. Sobre esta tesis

El objetivo de la presente tesis es estudiar los estados topológicos de materiales uni y bidimensionales, y analizar diferentes formas de manipulación y dirección de los mismos para obtener sistemas con nuevas propiedades. Para ello realizamos una investigación teórica, utilizando como base el modelo de Su-Schrieffer-Heeger, el cual presenta un carácter topológico nativo, y el grafeno. En este último caso el sistema es perturbado externamente, de manera tal de inducirle propiedades topológicas. La posibilidad de generar nuevas fases topológicas en materiales que presentan propiedades nativas de interés (como el grafeno), resulta atractiva para futuras aplicaciones en la industria electrónica y de nanodispositivos.

Específicamente, en el capítulo 2 de esta tesis investigamos el efecto Hall cuántico en una muestra de grafeno bajo la acción de un campo magnético externo. Probamos que, mediante la incorporación de un defecto lineal, es posible dirigir los estados topológicos de manera tal que intercambien el borde sobre el cual se desplazan (y por ende el sentido de movimiento), dividiendo el haz de electrones incidente. En el capítulo 3 nos centramos en el modelo de aislante topológico unidimensional de Su-Schrieffer-Heeger. Los estados topológicos nativos del mismo son modificados mediante la acción de una perturbación dependiente del tiempo. De esta manera es posible destruir los estados preexistentes o generar nuevos estados con propiedades diferentes. Un tercer problema se aborda en el capítulo 4 donde una muestra bicapa de grafeno se transforma en aislante topológico incorporando términos de acoplamiento de tipo Haldane o irradiándola con luz láser. Por la interacción de las dos capas del sistema, los estados topológicos de un dado borde pueden ser destruidos obteniendo así transporte direccional de carga, spin o valle.

Simulaciones computacionales

Para llevar a cabo las distintas investigaciones realizamos simulaciones computacionales de los sistemas involucrados. Empleamos el lenguaje de programación Python [166] y en particular el módulo Kwant desarrollado principalmente para el cálculo de propiedades de transporte cuántico [167]. Específicamente, éste utiliza los Hamiltonianos tight-binding en la base de los sitios correspondientes, tanto para muestras bulk como de tamaño finito. Para ello se define la celda unidad, los elementos de matriz de hopping con las celdas vecinas, y el vector de traslación

para los sistemas que se extienden infinitamente en una o más direcciones. Los cálculos se realizan de manera numérica, discreta y a partir de la versión matricial del Hamiltoniano.

En el desarrollo de esta tesis determinamos las propiedades espectrales y de transporte de los distintos aislantes topológicos estudiados. Utilizando el teorema de Bloch [81], calculamos las estructuras electrónicas de los sistemas bulk y el peso asociado a cada estado en un tipo de sitio (A o B) o región de la muestra. Para el caso del modelo de Su-Schrieffer-Heeger finito, donde no hay una dirección de simetría traslacional, computamos los estados electrónicos a partir de la diagonalización de la matriz Hamiltoniana. También analizamos el caso de una muestra semi infinita para lo cual desarrollamos códigos propios utilizando funciones de Green [168].

Las propiedades de transporte de los sistemas, y en particular las transmisiones electrónicas, son calculadas a partir de la matriz de scattering (o dispersión) de los modelos a estudiar [98]. Las mismas posibilitan también el cómputo posterior de las conductancias mediante el empleo del formalismo de Landauer-Büttiker [169]. De igual manera se determinan los estados de scattering, como la solución a dicha matriz, para el caso de la muestra de grafeno en una fase Hall cuántica entera y con la presencia de un defecto lineal (capítulo 2). Por último, las características topológicas del modelo SSH del capítulo 3 se comprueban también a través del cálculo del invariante topológico correspondiente. Para esto se utiliza el módulo PythTB para Python [170], el cual permite el cómputo de la fase de Zak [107] en su versión número y discreta siguiendo el desarrollo de Rafaelle Resta [171].

CAPÍTULO 2

EFECTO HALL CUÁNTICO EN GRAFENO CON UNA LÍNEA DE DEFECTOS

El efecto Hall cuántico en una muestra de grafeno monocristalina ha sido ampliamente estudiado (sección 1.2.1). Los primeros experimentos realizados sobre este material empleaban un campo magnético externo para determinar su característica de fermiones de Dirac [23, 24, 102]. La aplicación de este campo transforma al grafeno en un aislante topológico, confiriéndole así nuevas propiedades. Entre ellas, dos de las más interesantes son la generación de estados de borde quirales y robustos, y la cuantización de la conductancia Hall en múltiplos enteros de $4e^2/h$ [23, 24]. La alta precisión con la que puede determinarse el valor de conductancia en los plateaus Hall a temperatura ambiente, es la responsable de que este material sea empleado hoy en día en metrología como estándar de resistencia [103].

En los últimos tiempos la influencia de distintos tipos de desorden y defectos en grafeno en el régimen Hall cuántico ha despertado un gran interés. Específicamente, se ha investigado el efecto de la incorporación de impurezas puntuales, adátomos, vacancias y hasta campos magnéticos aleatorios [172, 173]. Pero recientemente, quienes han suscitado una mayor atracción son los defectos extendidos que se desarrollan a lo largo de una línea [63, 68, 70] (sección 1.1.1). Estas líneas de defecto pueden inducir, por ejemplo, una dispersión dependiente del valle de los electrones [73, 74, 174] y la formación de canales cuánticos unidimensionales [70, 71].

En muestras policristalinas de grafeno, los bordes de grano se pueden representar como defectos extendidos a lo largo de una línea [63, 175]. Los mismos se unen formando una red que, en el régimen Hall cuántico, puede corto-circuitar los estados de borde quirales [176]. Sin embargo, el rol de estas líneas de defecto en la respuesta Hall observada, no está aún determinado y permanece como un importante problema abierto [65, 176, 177]. Por ejemplo, una investigación previa indica que la presencia de defectos extendidos destruye los plateaus de la conductancia a dos terminales (local) casi automáticamente, al mismo tiempo que se desarrolla una resistencia longitudinal [177]. En cambio, en lo que respecta a la conductancia Hall, experimentos muestran que la respuesta es idéntica a la de grafeno prístino con desviaciones en

los plateaus de hasta un uno por ciento de e^2/h aún en muestras de gran tamaño (del orden de los milímetros) obtenidas por deposición química por vapor [178].

En el presente capítulo estudiamos cómo una única línea de defectos extendida altera la respuesta Hall cuántica de una muestra de grafeno, para así comprender el resultado obtenido experimentalmente en muestras policristalinas. En particular analizamos cómo se modifican los canales de conducción y si es posible dirigir los estados de borde topológicos del grafeno prístino. Investigamos también el efecto que producen el arreglo geométrico del sistema (las posiciones relativas del defecto y las sondas de voltaje y corriente) y los detalles microscópicos de la línea de defectos, en la respuesta del transporte electrónico. Finalmente comprobamos que una muestra de grafeno con una línea de defectos puede actuar como el análogo electrónico del divisor de haces en óptica.

2.1. Defecto lineal tipo 5-8-5

Uno de los defectos lineales más comúnmente estudiados en grafeno es el que se conoce como defecto 5-8-5 (o 5-5-8; figura 2.1). El mismo debe su nombre a los pentágonos y octógonos que se forman a lo largo de una línea de la muestra debido a la ausencia de pares de átomos de carbono. Esta clase de defectos puede ser de origen natural o bien producida artificialmente mediante, por ejemplo, el calentamiento Joule por la aplicación de una corriente eléctrica [68]. A partir de éste último es posible obtener líneas de defectos de diferentes largos con gran precisión, como la que se presenta en la microscopía de transmisión electrónica de ultra-alta resolución de la figura 2.1 [68]. También se pueden diseñar mediante crecimiento epitaxial en sustratos de níquel desplazados por medio vector de red [70], imitando lo que ocurre naturalmente en los bordes de grano en muestras policristalinas.

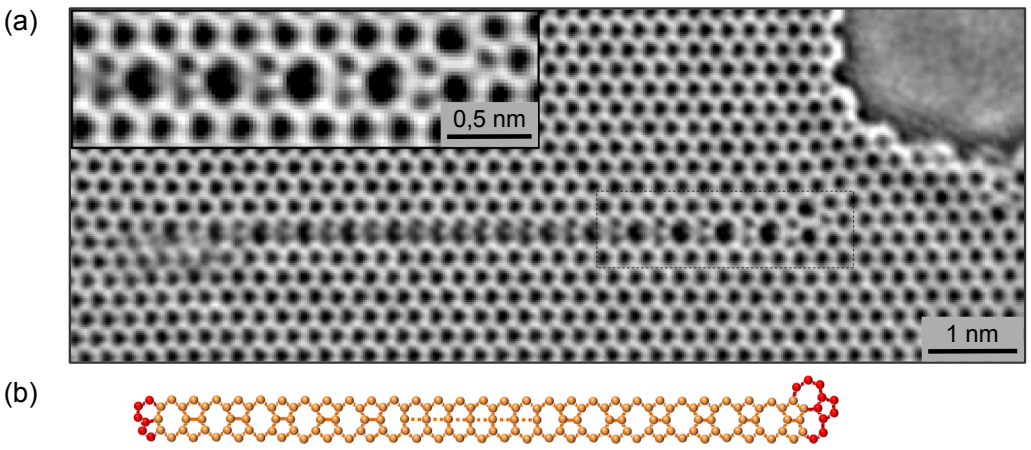


Figura 2.1: (a) Imagen de microscopía de transmisión electrónica de ultra-alta resolución de una muestra de grafeno con una línea de defectos tipo 5-8-5 generada a partir del calentamiento Joule por la aplicación de una corriente eléctrica. (b) Esquema de la línea de defectos tipo 5-8-5 presentada en (a). *Imagen adaptada de [68].*

El proceso de formación de la línea de defectos involucra la reconstrucción de una muestra con divacancias [69]. Como se observa esquemáticamente en la figura 2.2, si se elimina una celda unidad de una muestra de grafeno monocristalina, cuatro átomos de carbono permanecen con un electrón desapareado (átomos en verde en la figura 2.2 (b)). Éstos forman entonces un nuevo enlace de a pares con el átomo más próximo, originándose así dos pentágonos y un octógono (figura 2.2 (c)), en lugar de los hexágonos propios de la estructura tipo panal de abeja del grafeno. Finalmente, un desplazamiento de medio vector de red de la parte inferior de la muestra respecto de la superior, genera la estructura final y más estable del grafeno con una línea de defectos tipo 5-8-5 (figura 2.2 (d)).

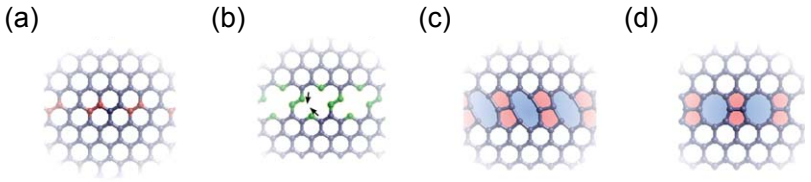


Figura 2.2: Esquema del proceso de formación de la línea de defectos tipo 5-8-5. (a) Muestra de grafeno prístina con los enlaces a eliminar resaltados en rojo. (b) La ausencia de los mismos genera divacancias en el sistema. (c) Reconstrucción de los enlaces para formar los dos pentágonos y el octógono del defecto lineal. (d) El desplazamiento de una mitad de la muestra genera la estructura final de la línea de defectos tipo 5-8-5. *Figura adaptada de [69].*

2.2. Modelo atomístico

Consideramos una cinta de grafeno embebida con una única línea de defectos y en el régimen Hall cuántico. Particularmente, estudiamos dos posibles configuraciones multiterminales: *paralela*, donde el defecto lineal es paralelo al borde de la cinta (figura 2.3 (a)); y *perpendicular*, para la cual la línea de defectos cruza el ancho de la muestra (figura 2.3 (b)). Usando un modelo atomístico determinamos a partir de simulaciones computacionales la conductancia local (entre las sondas fuente y sumidero, 1 y 6 en la figura 2.3) y no-local (Hall, entre los cables 2 y 4 o 2 y 5) cuando el dispositivo se encuentra sometido a un campo magnético externo perpendicular al plano del sistema.

Para modelar las distintas muestras de grafeno con el defecto lineal se emplea un Hamiltoniano tipo tight-binding que describe correctamente los electrones cerca de la energía de Fermi, tal como fue descripto en la introducción (sección 1.1.2). El campo magnético externo se incorpora al mismo mediante la sustitución de Peierls [179], modificando la fase de los elementros de matriz de hopping (γ_{ij}) a partir de la ecuación [6, 180]:

$$\gamma_{ij} = \gamma_0 \exp\left(\mathrm{i}\frac{2\pi}{\Phi_0}\int_{\boldsymbol{r}_i}^{\boldsymbol{r}_j} \mathbf{A}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{\ell}\right) \tag{2.1}$$

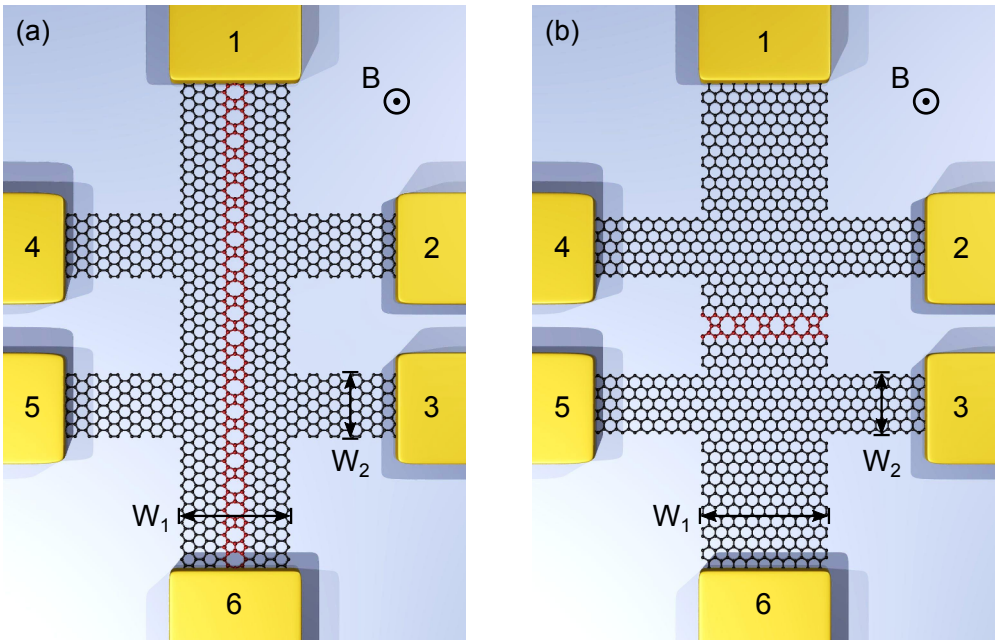


Figura 2.3: Esquemas de los sistemas multiterminales formados por cintas de grafeno con una línea de defectos tipo 5-8-5 en configuración (a) *paralela* y (b) *perpendicular*. El campo magnético se aplica perpendicularmente al plano de la muestra. W_1 y W_2 indican los anchos de la cinta y de los cables perpendiculares a la misma, respectivamente.

donde γ_0 corresponde al valor del hopping entre primeros vecinos en ausencia de una perturbación externa (en grafeno, $|\gamma_0| = 2{,}7$ eV), Φ_0 al cuanto de flujo magnético y $\mathbf{A}$ al potencial vector asociado al campo magnético externo.

La incorporación de la línea de defectos 5-8-5 a la cinta de grafeno prístina implica también una perturbación. Esta puede incorporarse al Hamiltoniano como pequeñas variaciones en las energías de sitio y los elementos de matriz de hopping alrededor del defecto [181]. Sin embargo, debido a que dichas correcciones son mínimas en porcentaje [71], en general es posible despreciarlas. Los efectos magnéticos que se derivan de la polarización por spin de los estados alrededor del defecto tampoco son considerados y podrían generar otros fenómenos físicos interesantes [69, 182]. En el presente capítulo, asumimos que la línea de defectos sólo genera cambios en la topología de la red, como se observa en la figura 2.2.

Para evitar reflexiones indeseadas producto de un cambio brusco en las condiciones experimentales del sistema, los dispositivos multiterminales simulados son del tipo “todo grafeno” (figura 2.3). Esto implica que los cables, al igual que la muestra, son cintas de grafeno. El campo magnético externo se incorpora también en todo el sistema, siendo importante en este caso que el gauge elegido preserve la invarianza traslacional en cada terminal. Es por esto que se emplea el gauge de Landau, según lo desarrollado en [183], de manera de interpolar suave y adecuadamente las diferentes formas del potencial vector.

2.2.1. Parámetros empleados en las simulaciones computacionales

Las propiedades espectrales y de transporte de la muestra de grafeno con una línea de defectos y en un régimen Hall cuántico entero se determinan a partir de simulaciones computacionales. El campo magnético externo utilizado en los cálculos fue elegido de manera tal que la longitud de decaimiento de los estados de borde hacia el centro de la muestra (ξ) fuera mucho menor que el ancho de la misma (W_1 en la figura 2.3). Particularmente, en los resultados presentados en el resto del capítulo, se simularon sistemas de ancho $W_1 = 37{,}4$ nm y $W_2 = 24{,}8$ nm, sujetos a un flujo magnético de 0,013 Φ_0 por plaqueta.

2.3. Estructura electrónica

Empecemos analizando la estructura eléctronica de una cinta de grafeno tipo zigzag con defecto lineal tipo 5-8-5 (figura 2.4 (b)). Para poder emplear el teorema de Bloch, definir el vector de onda $\boldsymbol{k}$, y determinar la estructura de bandas, es necesario que el sistema sea invariante frente a traslaciones en la dirección de crecimiento de la cinta. Es por esto que la estructura de bandas que se presenta en la figura corresponde al sistema de grafeno con línea de defectos en la configuración *paralela*.

En la relación de dispersión de la figura 2.4 (b), los círculos llenos corresponden a estados con peso en la zona alrededor del defecto (donde por peso nos referimos al módulo de la amplitud de probabilidad al cuadrado). Particularmente se consideraron los sitios que se encuentran a una distancia $2a$ desde el centro del defecto, tal como se esquematiza en la figura 2.4 (a) donde los mismos están pintados de negro. En la estructura de bandas, la magnitud del peso en dicha zona está representada por la escala de color del llenado de los círculos de manera análoga a la figura (a): blanco para estados cuyo peso es despreciable y negro para estados con el máximo valor posible. Esta forma de representar a la relación de dispersión mediante pesos nos da un indicativo de la densidad local de estados alrededor de la línea de defectos.

En primer lugar observamos en la estructura electrónica (figura 2.4 (b)) la formación de los niveles de Landau (puntos grises pequeños) correspondientes a una muestra de grafeno en el régimen Hall cuántico (sección 1.2.1). Sin embargo, y a diferencia del grafeno prístino, también se visualiza la presencia de estados localizados alrededor de la línea de defectos (línea rellena cuyo color está dado por la escala adjunta). Podemos notar que estos estados localizados presentan una gran semejanza con los estados que se encuentran en los bordes de la muestra y que se observan en la relación de dispersión como puntos grises pequeños con velocidad (pendiente) no nula alrededor de $k = 0$ y $k = 2\pi/a$.

Una diferencia significativa entre las estructuras de bandas del grafeno en presencia y ausencia del defecto lineal es la ruptura de la simetría electrón-hueco (simetría respecto de energía $\varepsilon = 0$) en el primer caso. Esto se debe a que el defecto lineal tipo 5-8-5 (figura 2.2 (d)) rompe la naturaleza bipartita de la red de grafeno y por ende quiebra la simetría electrón-hueco. Este resultado puede aprovecharse a la hora de

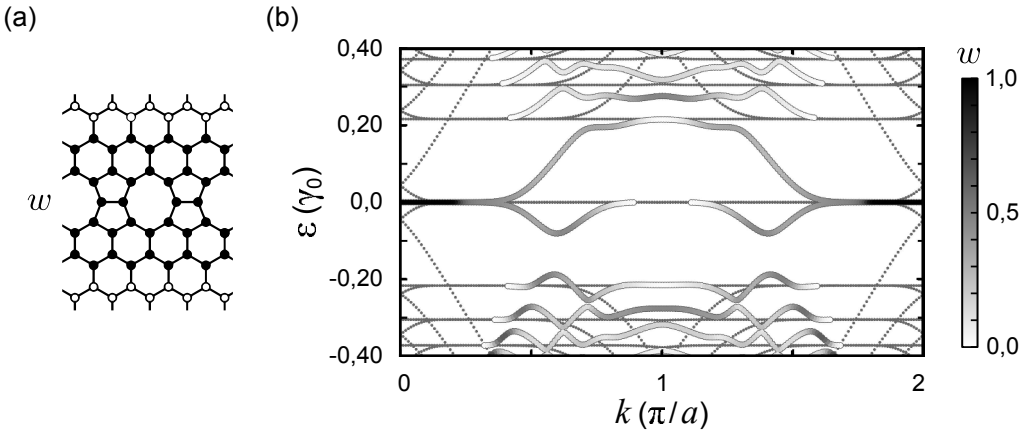


Figura 2.4: (a) Esquema de la línea de defectos tipo 5-8-5 donde los sitios que se consideraron para el cálculo del peso (w) se encuentran marcados en negro. (b) Estructura electrónica para una cinta de grafeno con bordes zigzag y con un defecto lineal 5-8-5 en configuración *paralela*. Los estados cuyo peso (módulo de la amplitud de probabilidad al cuadrado) es mayor a 0,01 en los átomos alrededor del defecto se muestran con una escala de color desde blanco ($w = 0$) a negro ($w = 1$).

considerar el transporte electrónico en el material ya que permite obtener respuestas diferentes variando únicamente la energía de Fermi.

Con respecto a los nuevos estados que se encuentran localizados alrededor de la zona del defecto, una pregunta que surge ineludiblemente es si son quirales; es decir, si los electrones se mueven en una dirección dada a lo largo de la línea de defectos y su velocidad no puede ser revertida. En pos de responder este interrogante, analizamos el peso de los estados en la mitad superior e inferior del defecto (w_{arriba} y w_{abajo} en la figura 2.5 (a), respectivamente). En particular encontramos que, para un estado dado, éste es no nulo en ambas regiones. Por lo tanto, a partir de pequeñas perturbaciones, un electrón podría cambiar de un estado a otro (ambos ubicados en la zona del defecto) y modificar así su dirección de movimiento. Podemos afirmar entonces que, si bien están localizados, los estados alrededor de la línea de defectos no son quirales.

Para algunas energías particulares, no obstante, existe una dirección de movimiento preponderante de los electrones a cada lado de la línea de defectos. Esto puede observarse en la figura 2.5 (b), donde se muestran los estados que se ubican predominantemente en cada una de las regiones del defecto. Para ello se emplea una escala de color de llenado dada por la diferencia de peso entre la mitad superior e inferior. Este resultado coincide con las principales características reportadas por Yao, Lü y Zhang [184]. Por otra parte, la física relacionada a estos estados localizados se asemeja a la de los estados de borde quirales, por lo cual los denominamos semi-quirales.

La no quiralidad de los estados localizados a uno y otro lado del defecto lineal tiene su origen en la hibridización entre los mismos. Esta última es también responsa-

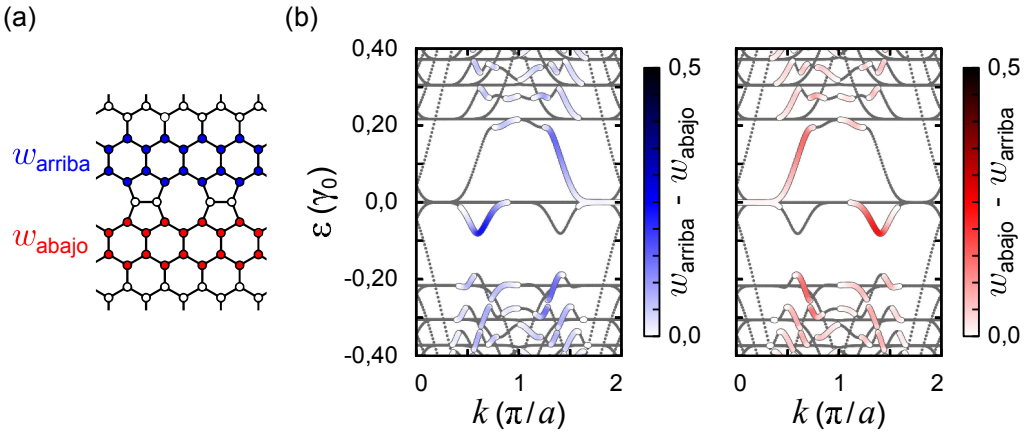


Figura 2.5: (a) Esquema de la línea de defectos tipo 5-8-5 donde los sitios que se consideraron para el cálculo de los pesos w_{arriba} y w_{abajo} se encuentran marcados en azul y rojo, respectivamente. (b) Estructura electrónica para una cinta de grafeno con bordes zigzag y con un defecto lineal 5-8-5 en configuración *paralela*. Los estados localizados predominantemente en la parte superior e inferior de la línea de defectos (con pesos $w_{arriba} - w_{abajo}$ y $w_{abajo} - w_{arriba}$ mayores a 0,01) se muestran con una escala de color desde blanco ($w = 0$) a negro ($w = 0{,}5$) atravesando por los azules y rojos, respectivamente.

ble de otros efectos como la presencia de gaps en la densidad de estados alrededor del defecto. De hecho, si reducimos el valor del elemento de matriz de hopping que conecta la línea central del defecto con el resto de la muestra (como se desarrolla en el siguiente apartado), dichos gaps se achican hasta cerrarse completamente cuando el valor es exactamente cero. Uno de estos gaps, por ejemplo, puede observarse en la figura 2.4 (b) alrededor de energía $\varepsilon = -0{,}15\gamma_0$ (entre los niveles de Landau $n = 0$ y $n = -1$). En dicha figura, la banda asociada al estado del defecto se ve interrumpida (alrededor de $k \approx 0{,}6\pi/a$ y $k \approx 1{,}4\pi/a$) en oposición a lo que ocurre con la banda análoga correspondiente al estado localizado en el borde de la muestra (en $k \approx 0{,}1\pi/a$ y $k \approx 1{,}9\pi/a$). La presencia de estos gaps en la densidad local de estados alrededor de la línea de defectos permite predecir que, dentro de ellos, el transporte electrónico no se va a ver modificado con respecto al del grafeno prístino en ninguna de las configuraciones del sistema (*paralela* o *perpendicular*).

Las propiedades espectrales antes mostradas, así como aquellas detalladas a continuación, se determinaron a partir de simulaciones computacionales. Específicamente empleamos códigos propios desarrollados utilizando el módulo Kwant para Python [167]. El Hamiltoniano tight-binding se incorpora al mismo a través de su representación atomística (sección 2.2). La estructura electrónica se calcula como los autovalores del Hamiltoniano para el sistema bulk con simetría de traslación espacial en la dirección x, paralela a los bordes de la cinta de grafeno. El peso de cada estado en una región dada de la muestra se determina por ende a partir de las componentes del autovector correspondiente.

2.3.1. Formación del defecto lineal

Los gaps en la densidad local de estados alrededor del defecto lineal tipo 5-8-5 se pueden explicar considerando el modelo de la figura 2.6 (a). En el mismo, la parte central del defecto está conectada al resto de la muestra a través de los elementos de hopping γ'. Cuando éste es nulo, el sistema se comporta como dos muestras de grafeno aisladas donde cada una de ellas presenta estados de borde quirales. A partir del momento en que $\gamma' \neq 0$, los estados de borde localizados de uno y otro lado del defecto se hibridizan, generando los gaps observados en la LDOS alrededor del defecto.

La transición de un sistema sin gaps en la densidad local de estados a uno con gaps, se ilustra en las estructuras electrónicas en las figuras 2.6 (b), (c) y (d). En las mismas pueden identificarse, en puntos grises, las bandas asociadas al efecto Hall cuántico entero en una muestra monocristalina de grafeno sin defectos (figura 1.13, sección 1.2.1); y también se observan, en puntos rojos, los nuevos estados localizados en la zona alrededor del defecto. Particularmente, en el caso en que $\gamma' = 0$ (figura 2.6 (b)), los mismos son estados de borde quirales ya que

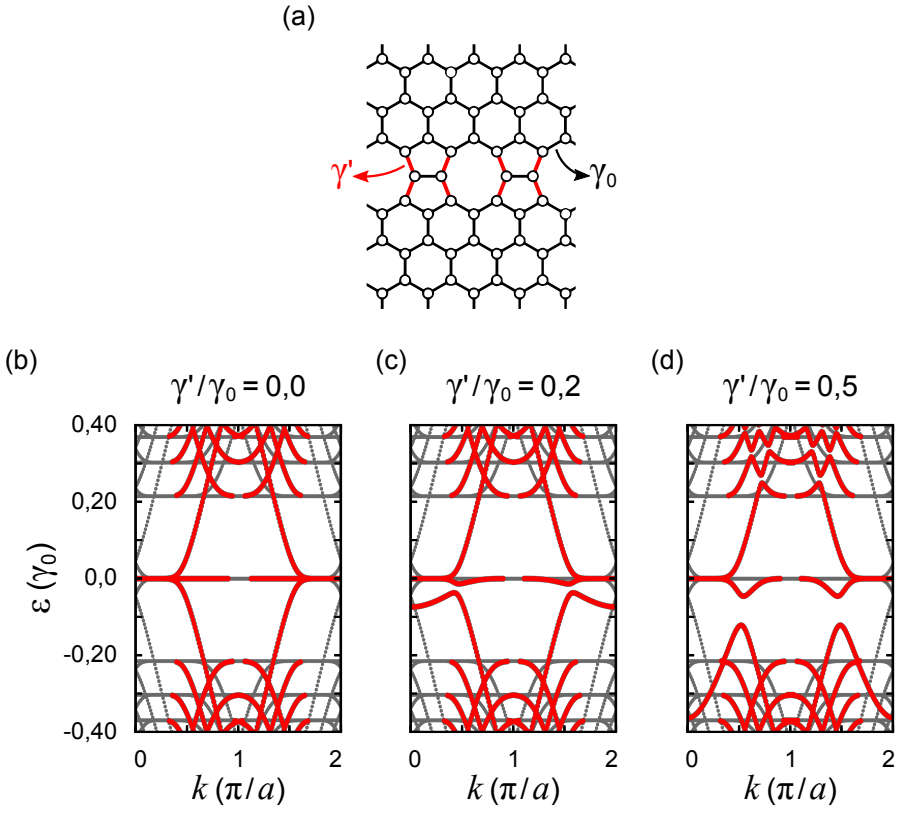


Figura 2.6: (a) Esquema de la línea de defectos tipo 5-8-5 con el enlace que forma la línea de defectos (γ') coloreado en rojo. (b) Estructura electrónica para una cinta de grafeno con bordes zigzag y con un defecto lineal 5-8-5 en configuración *paralela*, donde el valor de γ' aumenta de izquierda a derecha. Los estados localizados predominantemente alrededor de la línea de defectos están marcados en rojo.

ambas mitades de la muestra no están unidas al defecto. De hecho, en la relación de dispersión, la forma de las bandas es análoga a la de grafeno sólo que desplazada en el valor del vector de onda. Esto se debe a que la celda unidad del sistema con el defecto lineal es del doble del tamaño que para el grafeno monocristalino. Cuando $\gamma' \neq 0$, queda en evidencia que los estados alrededor del defecto se diferencian de los de borde (figuras 2.6 (c) y (d)) y se generan los gaps antes mencionados.

2.3.2. Correcciones a la parametrización

En el cálculo de las estructuras electrónicas anteriores, el defecto lineal fue incorporado al modelo como un cambio en la topología del sistema (tal como se describió en la sección 2.2). Una manera de que el modelo sea aún más representativo de la muestra real de grafeno con defecto tipo 5-8-5, y por ende más preciso, es introduciendo también una corrección en las energías de sitio alrededor del defecto. A partir de cálculos ab-initio, se determinó que aquellos sitios ubicados a una distancia de hasta $6a$ de la línea de defectos presentan un cambio significativo en su energía, siendo la mayor variación de $0{,}07\gamma_0$ [181]. Considerando esta corrección, la estructura electrónica mostrada en la figura 2.4 (b) se ve sutilmente modificada, y la nueva relación de dispersión corresponde a la presentada en la figura 2.7 (b).

El principal efecto de la corrección en las energías de sitio es el de introducir un pequeño cambio en los estados localizados alrededor del defecto que se encuentran a energía $\varepsilon \approx 0$. Particularmente, dichos estados dejan de ser bandas planas a energía nula, para pasar a tener una leve velocidad neta. Sin embargo, el resto de las características, como la localización espacial de los estados alrededor de la línea de defectos, su (semi) quiralidad y los gaps en la densidad local de estados,

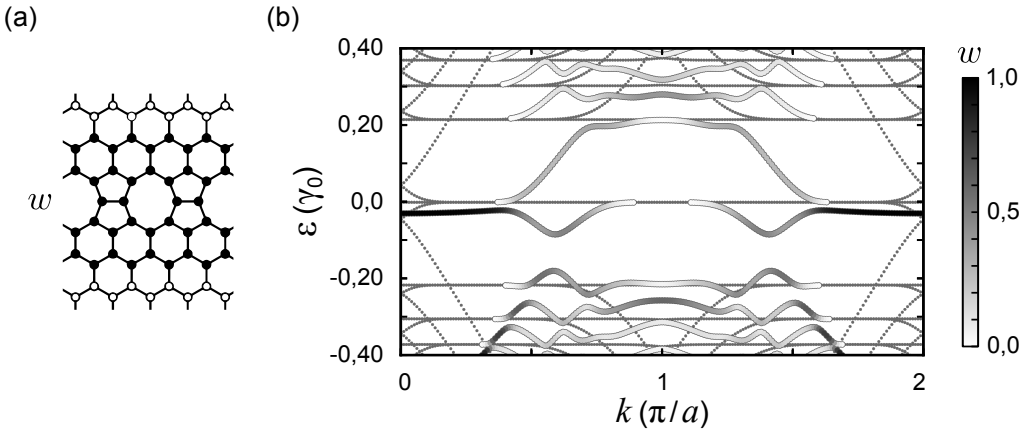


Figura 2.7: (a) Esquema de la línea de defectos tipo 5-8-5 donde los sitios que se consideraron para el cálculo del peso (w) se encuentran marcados en negro. (b) Estructura electrónica para una cinta de grafeno con bordes zigzag y con un defecto lineal 5-8-5 en configuración *paralela*, considerando correcciones a la parametrización. Los estados cuyo peso (módulo de la amplitud de probabilidad al cuadrado) es mayor a 0,01 en los átomos alrededor del defecto se muestran con una escala de color desde blanco ($w = 0$) a negro ($w = 1$).

permanecen inalteradas. Es por esto que, tal como se había asumido anteriormente (sección 2.2), en adelante se desprecia esta modificación y se continúa trabajando sólo con la descripción más sencilla del sistema.

2.4. Estados de scattering

Para comenzar a indagar en el comportamiento del transporte electrónico en el sistema de grafeno con un defecto lineal bajo la acción de un campo magnético externo, analizamos los estados de scattering (dispersión) para distintas energías y condiciones de contorno asintóticas. Definimos a estos estados como el módulo al cuadrado de la función de onda de scattering resultante cuando se inyectan electrones a la muestra desde un cable dado. Podemos estudiar en particular los estados para dos energías que son representativas de las diferentes situaciones del sistema: $\varepsilon = -0{,}15\gamma_0$, valor que se encuentra dentro del gap en la densidad local de estados del defecto, y $\varepsilon = +0{,}1\gamma_0$, energía a la cual existen estados localizados en la región alrededor de la línea de defectos. Los mismos fueron calculados a partir de la matriz de scattering del sistema a través de códigos desarrollados en el módulo Kwant para Python [167].

Las funciones de onda al cuadrado para electrones incidiendo desde el cable 1 en la configuración *paralela* (figura 2.3 (a)) se muestran en las figuras 2.8 (a) y (b). En particular, la figura (a) corresponde a la energía $\varepsilon = -0{,}15\gamma_0$, mientras que la (b) es para el caso $\varepsilon = +0{,}1\gamma_0$. La primera diferencia significativa que se puede notar es la reversión de la quiralidad de los estados presentes en los bordes de la muestra de grafeno. Para una energía negativa, el estado se encuentra localizado en el borde inferior de la cinta; mientras que cuando $\varepsilon > 0$ se ubica en el superior. Este resultado es análogo al observado en una muestra de grafeno prístina en una fase tipo Hall cuántica entera, donde los electrones en el borde de la misma presentan una dirección única de movimiento y la retrodispersión (backscattering) está imposibilitada.

Por otra parte, podemos ver que nuevos canales de conducción se abren alrededor de la línea de defectos para $\varepsilon = +0{,}1\gamma_0$ (figura 2.8 (b)). Los mismos están presentes en casi todo el rango de energía excepto, por ejemplo, alrededor de $\varepsilon \approx -0{,}15\gamma_0$, donde se abre el gap en la densidad local de estados alrededor del defecto como se mencionó previamente. Los electrones en estos canales también tienen una dirección predominante de movimiento, según lo descripto a partir de la estructura electrónica (sección 2.3). De hecho, es posible notar que en este caso los electrones que se mueven de izquierda a derecha están preferentemente localizados en la región inferior del defecto lineal. En el esquema de la figura 2.8 (c) se evidencia, con flechas de colores rojo y azul (correspondientes a los utilizados en la estructura electrónica pesada, figuras 2.5 (b) y (c)), la dirección preferencial de movimiento de los electrones a uno y otro lado del defecto.

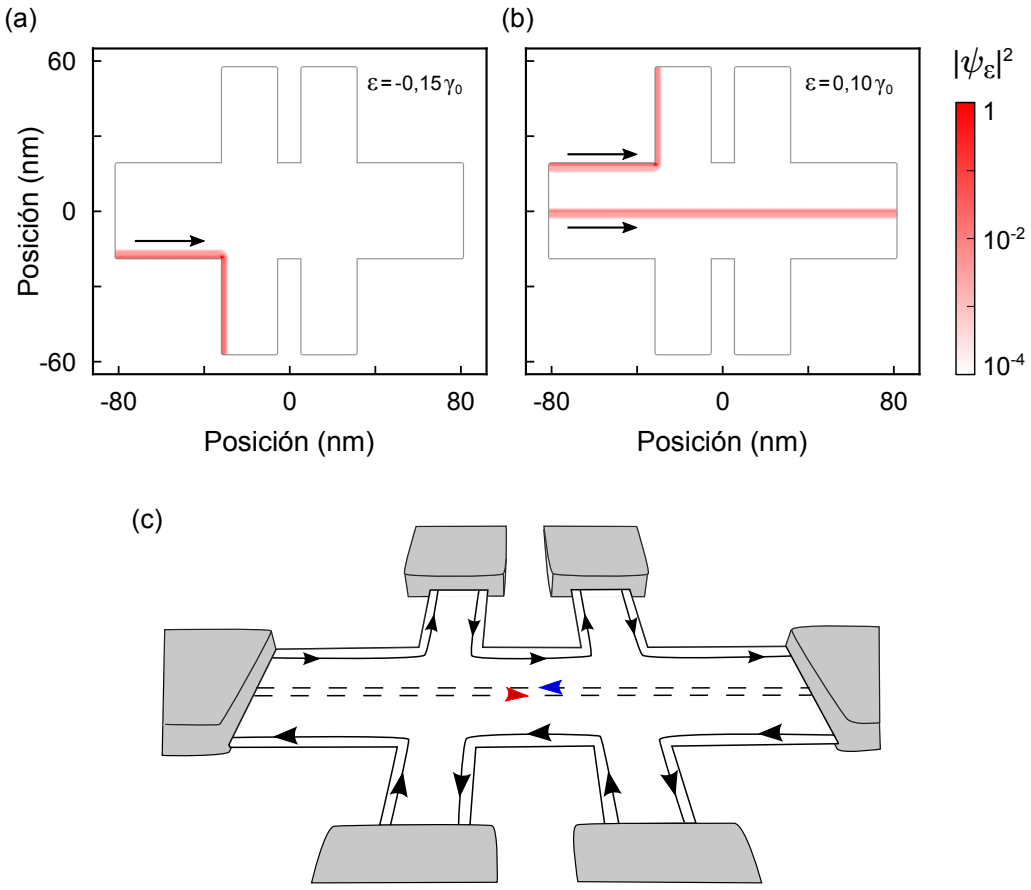


Figura 2.8: Estados de scattering para una cinta de grafeno con una línea de defectos tipo 5-8-5 en configuración *paralela*. Los mismos se calcularon para la condición en la cual los electrones inciden desde el cable de la izquierda (marcado con flecha) y a energías (a) $\varepsilon = -0{,}15\gamma_0$, y (b) $\varepsilon = 0{,}10\gamma_0$. Los estados de borde disponibles en este último caso se muestran esquemáticamente en (c).

El comportamiento descripto anteriormente puede cambiar drásticamente cuando estudiamos la configuración *perpendicular* del grafeno con línea de defectos. Las figuras 2.9 (a) y (b) muestran los estados de scattering para electrones inyectados desde los cables superiores (marcados con flechas) a energías $\varepsilon = -0{,}15\gamma_0$ y $\varepsilon = +0{,}1\gamma_0$, respectivamente. De manera semejante a lo analizado para la configuración *paralela* en la figura 2.8 (a), podemos notar en la figura 2.9 (a) que para $\varepsilon = -0{,}15\gamma_0$ el defecto no provee dispersión sustancial. Esto se debe a que no hay estados localizados alrededor del mismo a dicha energía y por ende la respuesta al transporte electrónico es independiente de la presencia y de la ubicación del defecto lineal.

Cuando el defecto está activo a una determinada energía (como ocurre a $\varepsilon = +0{,}1\gamma_0$, figura 2.9 (b)), el comportamiento del sistema es al mismo tiempo semejante y diferente en ambas configuraciones. Por un lado, es similar en el sentido de que se abren nuevos canales de conducción de electrones alrededor de la línea de defectos. Sin embargo, debido a la ubicación geométrica de la misma, los electrones ya no tienen la misma dirección de movimiento a través de estos canales que

en el borde (como sucedía en la configuración *paralela* donde la corriente neta era de izquierda a derecha). Podemos notar, en particular, que el haz original se separa en dos partes: la primera sigue la misma trayectoria que en una muestra de grafeno monocristalina, mientras que la segunda aprovecha el nuevo canal localizado alrededor del defecto lineal para cambiar de lado de la cinta. Estas direcciones de movimiento se encuentran esquematizadas en la figura 2.9 (c), donde el color de la flecha está de acuerdo a la localización en uno u otro lado del defecto (y en analogía a las figuras 2.5 (b) y (c)). Debido a la factibilidad de cruce de los electrones de uno a otro borde de la cinta de grafeno a través de la línea de defectos tipo 5-8-5, podemos concluir que el defecto lineal en la configuración *perpendicular* cumple la función de divisor de haz.

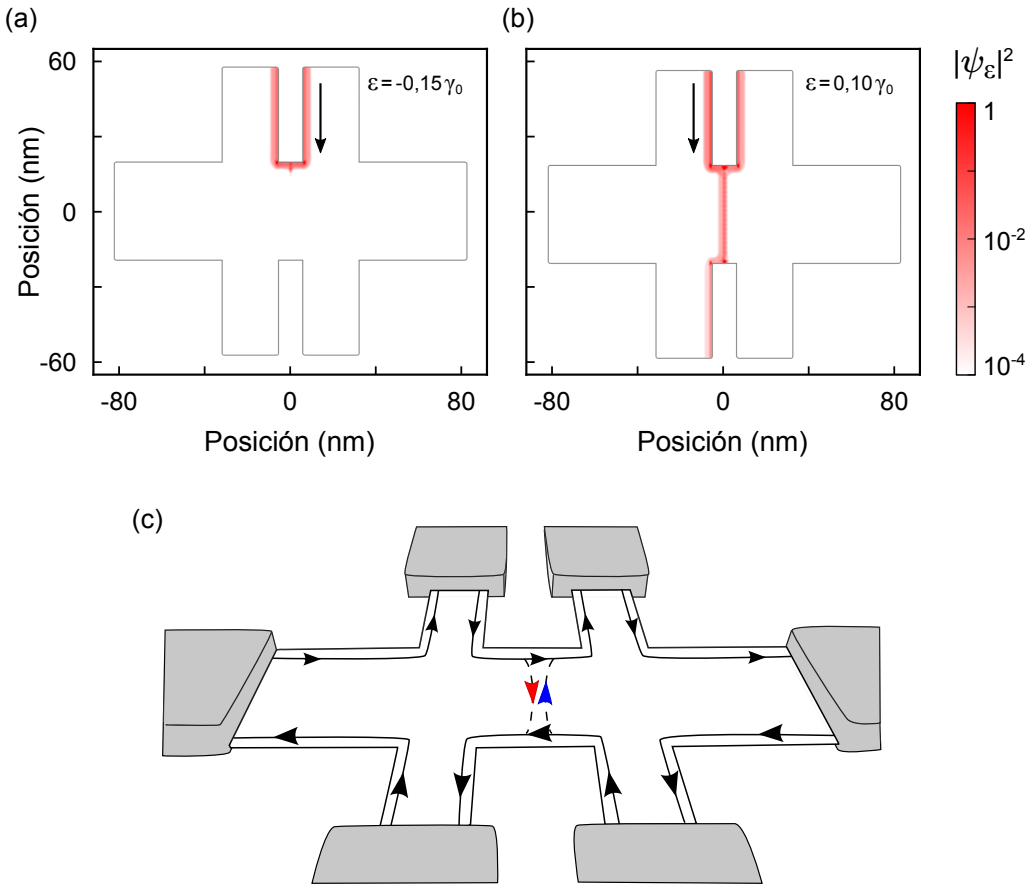


Figura 2.9: Estados de scattering para una cinta de grafeno con una línea de defectos tipo 5-8-5 en configuración *perpendicular*. Los mismos se calcularon para la condición en la cual los electrones inciden desde uno de los cables superiores (marcado con flecha) y a energías (a) $\varepsilon = -0{,}15\gamma_0$, y (b) $\varepsilon = 0{,}10\gamma_0$. Los estados de borde disponibles en este último caso se muestran esquemáticamente en (c).

2.5. Transporte electrónico

Una de las características más distintivas y sobresalientes del grafeno en el régimen Hall cuántico es la estructura de plateaus que se observa en la gráfica de conductancia en función de la energía (sección 1.2.1). De hecho, la alta precisión con la que se puede determinar por ejemplo la conductancia Hall y la resistencia correspondiente, es el motivo por el cual en la actualidad se utiliza este sistema como patrón estándar de resistencia en metrología. Estos plateaus tienen su origen en la peculiar estructura electrónica con niveles de Landau y estados de borde topológicos quirales que presenta el grafeno prístino bajo la acción de un campo magnético externo.

En las secciones anteriores analizamos cómo la presencia de un defecto lineal tipo 5-8-5 en la muestra modifica la estructura electrónica del grafeno. En particular comprobamos la aparición de nuevos estados de borde localizados alrededor del defecto que actúan como canales de conducción, según lo determinado a partir de los estados de scattering (dispersión). La pregunta que surge entonces es, ¿cómo se ve afectada esta respuesta tan singular del transporte electrónico por la inclusión de la línea de defectos en la muestra de grafeno?

A fin de responder a este interrogante, estudiamos la conductancia tanto local como no-local, en función de la energía del sistema, para ambas configuraciones (*paralela* y *perpendicular*). Por conductancia local hacemos referencia a la usualmente calculada, aquella a dos terminales donde la corriente y el voltaje se miden entre los mismos electrodos (insets figuras 2.10 (a) y (b)). Por otro lado, la conductancia no-local (o Hall) corresponde a la conductancia medida en la configuración Hall donde el voltaje de bias es medido perpendicularmente a la corriente inyectada (insets 2.10 (c) y (d)).

En el límite coherente, la conductancia se puede determinar empleando el formalismo de Landauer Büttiker [98, 169]. Específicamente, la corriente en el cable α, en el límite de bajo voltaje de bias y de baja temperatura, está dada por:

$$\mathcal{I}_\alpha = \frac{2e}{h} \sum_\beta \left[\mathcal{T}_{\beta,\alpha}(\varepsilon_F)\mu_\alpha - \mathcal{T}_{\alpha,\beta}(\varepsilon_F)\mu_\beta \right] \tag{2.2}$$

donde $\mathcal{T}_{\beta,\alpha}$ es la probabilidad de transmisión desde el cable α al β y $\{\mu_\alpha\}$ son los potenciales químicos de cada cable. A partir de las simulaciones computacionales realizadas, podemos determinar las $\mathcal{T}_{\beta,\alpha}$ para cada energía. Con esta información, fijando un voltaje de bias pequeño $\delta V = (\mu_1 - \mu_6)/e$ entre los cables 1 y 6 (figura 2.3), y estableciendo que las corrientes en los cables superiores e inferiores es cero, podemos resolver el conjunto de ecuaciones y obtenter la conductancia a dos terminales $G = \mathcal{I}_1/\delta V$, y la conductancia Hall $G_{xy} = e\mathcal{I}_1/(\mu_2 - \mu_4)$ (o equivalentemente $G_{xy} = e\mathcal{I}_1/(\mu_3 - \mu_5)$) del sistema [98].

A continuación indagamos en las propiedades de transporte electrónico para las muestras de grafeno con una línea de defectos en el régimen Hall cuántico. Para ello

calculamos las probabilidades de transmisión a partir de la matriz de scattering del sistema. Elaboramos códigos propios basados en el módulo Kwant para Python [167] donde incorporamos el Hamiltoniano tight-binding en su representación atomística.

En la figura 2.10 se presentan en línea roja (con el área por debajo sombreada) las conductancias local (G, gráficos (a) y (b)) y no-local (G_{xy}, (c) y (d)) para una muestra de grafeno con defecto lineal. Los gráficos de la izquierda ((a) y (c)) corresponden a la configuración *paralela*; mientras que los de la derecha ((b) y (d)) a la *perpendicular*. Además, como referencia, se muestran también las respectivas conductancias para una muestra de grafeno prístina (línea sólida negra).

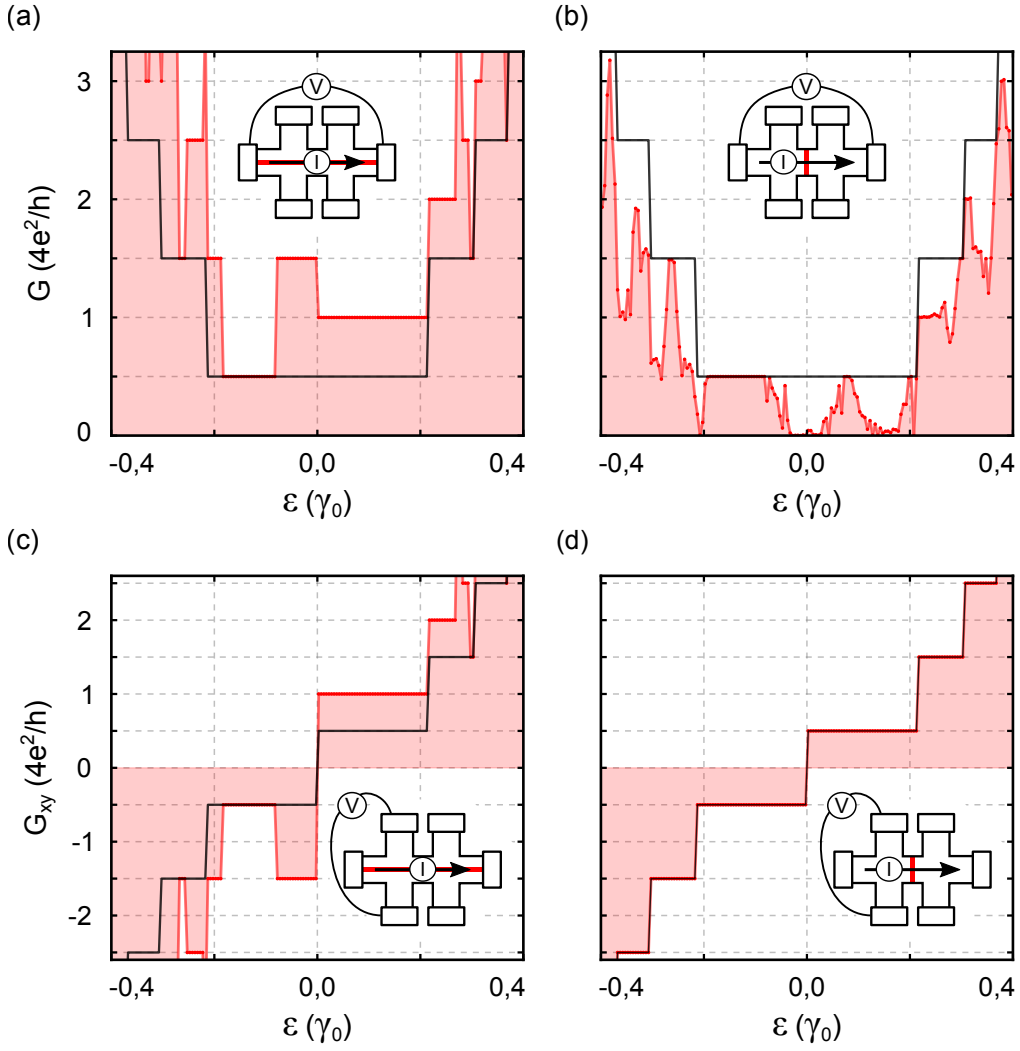


Figura 2.10: Conductancia a dos terminales para una cinta de grafeno prístina (línea negra) y con una línea de defectos tipo 5-8-5 (línea roja con área sombreada por debajo) en configuración (a) *paralela* y (b) *perpendicular* en función de la energía de Fermi. La conductancia Hall correspondiente a los mismos dispositivos se presenta en (c) y (d), respectivamente. Los arreglos geométricos empleados se muestran en los esquemas insertados en cada figura para una referencia más directa.

Al analizar la conductancia local o a dos terminales del sistema cuya configuración es *paralela* (figura 2.10 (a)), se puede notar el desarrollo de nuevos plateaus en G respecto a los correspondientes para grafeno monocristalino. Dichos plateaus son una huella propia del carácter balístico del transporte de electrones en el material, por lo que podemos afirmar que éste permanece inalterado aun en presencia del defecto lineal. El incremento (o disminución) de la conductancia respecto al caso prístino da cuenta del número de canales que se habilitan (o inhabilitan) por la presencia de la línea de defectos. En la figura 2.10 (a) observamos que G es siempre mayor o igual que G_0, resultado que indica que el defecto en esta configuración sólo habilita nuevos canales de conducción (de manera similar a un cable). Es interesante notar también que el aumento no es constante en todo el rango de energía, sino que presenta diferentes características en distintas zonas. Por ejemplo, podemos indentificar que se recupera el valor de G correspondiente al grafeno prístino en la región en la cual la densidad local de estados alrededor del defecto es nula ($\varepsilon \approx -0{,}15\gamma_0$).

La conductancia a dos terminales cambia drásticamente para la muestra de grafeno con línea de defecto en configuración *perpendicular* (figura 2.10 (b)). En este caso, la adición del defecto deteriora fuertemente el transporte, hasta el punto en que se rompen los plateaus de conductancia propios del grafeno prístino. Este resultado se observa en un amplio rango de energías, equivalente a aquel donde el transporte en la figura 2.10 (a) se ve favorecido. Sin embargo, y también como sucede para la configuración *paralela*, existen regiones donde se recupera la respuesta del grafeno monocristalino que coinciden con aquellas donde la densidad local de estados alrededor del defecto se anula.

Las observaciones anteriores se complementan con las correspondientes a las curvas de conductancia Hall en función de la energía. Para la configuración *paralela*, nuevos plateaus emergen también en la G_{xy} (figura 2.10 (c)). Esta respuesta es consistente con el comportamiento balístico advertido en la conductancia local. Pero más interesante resulta la curva de conductancia Hall para la configuración *perpendicular* (figura 2.10 (d)), para la cual se recuperan exactamente los plateaus del grafeno prístino (las curvas rojas y negras se encuentran superpuestas). El contraste entre las conductancias local y no-local para el sistema con el defecto lineal perpendicular al borde de la cinta de grafeno (figuras 2.10 (b) y (d)) es sumamente evidente.

Por todo lo anterior, podemos distinguir claramente dos situaciones diferentes dependiendo de la ubicación geométrica de la línea de defectos respecto a los bordes de la muestra. En primer lugar, para el caso *paralelo*, probamos que el defecto agrega canales conductores bastante localizados alrededor del mismo que se traducen en nuevos plateaus en las conductancias local y no-local. De hecho, estas respuestas se parecen a la de dos resistores en paralelo, dadas por la suma de las conductancias de grafeno prístino más una contribución debido a los estados en la zona del defecto.

Contrariamente, en la configuración *perpendicular* la línea de defectos puentea bordes opuestos de la muestra de grafeno, generando que los estados de borde

topológicos quirales se cortocircuiten. La existencia de un canal electrónico que une ambos bordes produce un incremento en la resistencia longitudinal, pero que, según lo descripto previamente, no afecta los plateaus de conductancia no-local. Es en esta configuración donde el defecto extendido actúa como el análogo eléctrico del divisor de haces en óptica. De hecho, debido a la particular dependencia de la transmisión entre bordes con la energía, es posible encenderlo y apagarlo aplicando únicamente un potencial eléctrico externo perpendicular a la muestra. Este resultado permite imaginar el empleo del defecto lineal tipo 5-8-5 para la realización de funciones lógicas y la manipulación de las corrientes a través de los estados de borde topológicos en futuras aplicaciones tecnológicas.

2.5.1. Modelo teórico mínimo

En la sección anterior comprobamos la existencia de diferencias en las conductancias local y no-local respecto de las del grafeno prístino para las configuraciones estudiadas. Como paso consecuente, surge entonces indagar sobre el origen de estas variaciones. Particularmente, llama la atención el hecho de que exista un mecanismo responsable de debilitar de manera significativa la conductancia a dos terminales en la configuración *perpendicular*, al mismo tiempo que mantiene inalterados los plateaus Hall. Para comprender estas observaciones, desarrollamos un modelo teórico mínimo capaz de reproducirlas.

Empecemos con el caso de la muestra de grafeno con una línea de defectos en configuración *paralela*. Como se planteó previamente, las corrientes involucradas en el transporte electrónico en este sistema siguen el formalismo de Landauer Büttiker y están dadas por la ecuación 2.2. Considerando esta teoría y el esquema de la figura 2.8 (c), podemos construir un modelo teórico incluyendo un número mínimo de variables que reproduzca las conductancias obtenidas a partir de las simulaciones computacionales. Las ecuaciones resultantes para la corriente en cada cable están dadas por:

$$\begin{pmatrix} I \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -I \end{pmatrix} = \frac{1}{R_0} \begin{pmatrix} \nu_T & 0 & 0 & -\nu_g & 0 & -\nu_d \\ -\nu_g & \nu_g & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\nu_g & \nu_g & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \nu_g & -\nu_g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \nu_g & -\nu_g \\ -\nu_d & 0 & -\nu_g & 0 & 0 & \nu_T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \\ \mu_4 \\ \mu_5 \\ \mu_6 \end{pmatrix}$$

En este modelo definimos que los cables 1 y 6 (figura 2.3 (a)) actúan como fuente y sumidero, respectivamente. Además, ν_g representa el número de canales de borde de la muestra de grafeno prístina (donde la quiralidad del estado correspondiente está dada por el signo que lo antecede), ν_d es la contribución a la matriz de conductancia debido a la línea de defectos y $\nu_T = \nu_g + \nu_d$ es la suma total de canales de conducción en la muestra. Si bien este modelo se planteó para energías positivas (siguiendo la

figura 2.8 (c)), uno equivalente puede realizarse para las negativas (donde cambia la quiralidad de los estados). Es importante resaltar que, además, ν_g y ν_d son funciones de la energía exacta de los portadores de carga, y ν_d también lo es de los detalles microscópicos del defecto.

A partir de esta ecuación matricial (y considerando el desarrollo posterior de la ecuación 2.2) determinamos entonces las conductancias a dos terminales y Hall para una muestra de grafeno con un defecto lineal tipo 5-8-5 en configuración *paralela*:

$$\begin{aligned} G_{\text{paralelo}} &= \nu_T \,/\, R_0 \\ &= \nu_g \,/\, R_0 \;+\; \nu_d \,/\, R_0 \\ &= G_0 \;+\; G_{\text{defecto-lineal}} \end{aligned} \tag{2.3}$$

$$\begin{aligned} G_{xy(\text{paralelo})} &= \nu_T \,/\, R_0 \\ &= \nu_g \,/\, R_0 \;+\; \nu_d \,/\, R_0 \\ &= G_{xy(0)} \;+\; G_{xy(\text{defecto-lineal})} \end{aligned} \tag{2.4}$$

donde $R_0 = h/(2e^2)$ es el cuanto de resistencia (considerando la degeneración de spin). Los subíndices 0 y defecto-lineal corresponden a las conductancias para la muestra de grafeno monocristalina y la contribución debido a los estados localizados alrededor del defecto, respectivamente. En el caso de energías negativas, tanto en el grafeno prístino como en el sistema *paralelo*, la conductancia local conserva su signo (se mantiene positiva) mientras que la Hall cambia de signo (tal como puede apreciarse en la figura 2.10). En las ecuaciones 2.3 y 2.4, se torna evidente que G y G_{xy} siguen la regla de la suma como ocurre para dos resistencias en paralelo.

Por otra parte, sabemos que en la muestra de grafeno *perpendicular*, los electrones tienen la posibilidad de continuar por el canal formado por los estados de borde quirales o cruzar de uno a otro lado de la cinta a través de la línea de defectos (figura 2.9 (b) de los estados de scattering o dispersión). Este comportamiento del transporte electrónico replica el determinado para un sistema de 6 terminales con una constricción en la configuración Hall [98]. Por lo tanto, y en analogía con el mismo, podemos plantear un modelo teórico mínimo cuyas ecuaciones de corriente en los cables (según ecuación 2.2) son:

$$\begin{pmatrix} I \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -I \end{pmatrix} = \frac{1}{R_0} \begin{pmatrix} \nu_g & 0 & 0 & -\nu_g & 0 & 0 \\ -\nu_g & \nu_g & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\nu_t & \nu_g & 0 & -\nu' & 0 \\ 0 & -\nu' & 0 & \nu_g & -\nu_t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \nu_g & -\nu_g \\ 0 & 0 & -\nu_g & 0 & 0 & \nu_g \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \\ \mu_4 \\ \mu_5 \\ \mu_6 \end{pmatrix}$$

Al igual que en el caso *paralelo*, asumimos para este modelo que los cables 1 y 6 (figura 2.3 (b)) actúan como fuente y sumidero, respectivamente, y denominamos ν_g al número de canales de conducción en los bordes de una muestra prístina. Además, ν'

corresponde a la fracción de electrones que son deflectados en la línea de defectos y ν_t los que no se ven afectados por el mismo (de manera tal que $\nu_g = \nu' + \nu_t$). Nuevamente, el modelo planteado es válido para energías positivas (siguiendo la figura 2.9 (c)), y uno equivalente puede desarrollarse para $\varepsilon < 0$ (considerando el cambio de quiralidad de los estados). Es importante remarcar una vez más que ν', ν_t y ν_g dependen de la energía de los electrones incidentes, y los dos primeros, en particular, también dependen de los detalles microscópicos del defecto.

En base a este modelo es posible determinar entonces los valores de conductancia local y no-local para la muestra de grafeno con un defecto lineal *perpendicular*:

$$\begin{aligned} G_{\text{perpendicular}} &= \nu_t \,/\, R_0 \\ &= \nu_g \,/\, R_0 \;-\; \nu' \,/\, R_0 \\ &= G_0 \;+\; \Delta G_{\text{por presencia del defecto lineal}} \end{aligned} \tag{2.5}$$

$$\begin{aligned} G_{xy(\text{perpendicular})} &= \nu_g \,/\, R_0 \\ &= G_{xy(0)} \end{aligned} \tag{2.6}$$

con $R_0 = h/(2e^2)$ el cuanto de resistencia y el subíndice 0 para la muestra de grafeno monocristalina en ausencia del defecto, al igual que en las ecuaciones 2.3 y 2.4. Para energías negativas, como se observa en la figura 2.10, $G_{\text{perpendicular}}$ y G_0 conservan su signo (se mantienen positivas), mientras que las conductancias Hall (del grafeno prístino y del sistema *perpendicular*) cambian de signo.

De los valores obtenidos en las ecuaciones 2.5 y 2.6, un par de puntos llaman la atención. En primer lugar, y tal como observamos previamente en la figura 2.10 (d), la conductancia Hall no se ve modificada por la presencia del defecto. En contraste, la conductancia a dos terminales sí varía (figura 2.10 (b)), y el cambio está dado por la fracción de electrones incidentes cuya trayectoria es deflectada por la línea de defectos. Resulta interesante también comprobar que, tal como anticipamos en la sección 2.5, debido a la posibilidad de conducción entre los distintos bordes de la muestra, la resistencia longitudinal (R_{xx}) es no nula (para energías negativas, el valor correspondiente es opuesto al calculado):

$$\begin{aligned} R_{xx(\text{perpendicular})} &= \frac{(\mu_2 - \mu_3)e}{\mathcal{I}_1} \\ &= \frac{\nu'}{\nu_g \cdot \nu_t} \cdot R_0 \\ &= \frac{\nu'}{\nu_g \cdot (\nu_g - \nu')} \cdot R_0 \end{aligned} \tag{2.7}$$

La proporción de electrones para la cual la trayectoria se ve modificada por la presencia del defecto lineal depende de la energía a la cual se encuentra el sistema. En esta peculiar relación subyace la razón por la cual el divisor de haces pueda ser apagado y encendido aplicando un potencial eléctrico externo perpendicular a la muestra (o voltaje de compuerta), como se observa por ejemplo en las figuras 2.9 (a)

y (b), respectivamente. Para poder predecir la dependencia con la energía de manera precisa (para cualquiera de las dos configuraciones), se requiere de un cálculo atomístico completo. Sin embargo, las conclusiones generales referidas a las conductancias locales y no-locales obtenidas a partir de las simulaciones computacionales (sección 2.5) pueden ser bien interpretadas cualitativamente con estos modelos teóricos mínimos desarrollados.

2.5.2. Efecto de la geometría en la respuesta Hall

En las figuras 2.10 (c) y (d) observamos que la conductancia no-local depende fuertemente de la configuración geométrica del defecto lineal en la cinta de grafeno. En el caso de una muestra *paralela*, la línea de defectos agrega canales de conducción localizados alrededor de la misma y nuevos plateaus en la respuesta Hall. En cambio, para una configuración *perpendicular*, ésta actúa como un puente entre los estados de borde topológicos (y quirales) de la muestra de grafeno prístina. Sin embargo, la ubicación de la línea de defectos no es la única geometría que puede modificar la respuesta observada. Específicamente, la posición de las sondas de corriente o voltaje relativa al defecto es una variable a considerar principalmente para la configuración *perpendicular*.

Los sistemas simulados en el presente capítulo corresponden a sistemas de 6 terminales (figuras 2.3 (a) y (b)). En los mismos, los cables 1 y 6 se utilizan como fuente y sumidero de la corriente eléctrica, mientras que el voltaje Hall se puede medir entre cualquier par de los cuatro cables restantes (siempre y cuando uno se encuentre unido a la mitad superior y el otro a la inferior de la cinta de grafeno). Para la configuración *paralela*, la respuesta obtenida es indistinta si se emplean los pares de cables (2,4) y (2,5) (o equivalentemente (3,4) y (3,5)). Esto se debe a que la muestra presenta simetría de traslación en la dirección de los cables 1 y 6, es decir, no varía en la región central entre cables vecinos.

Sin embargo, la influencia del defecto en la conductancia no-local depende fuertemente de la ubicación de las sondas de voltaje, cuando el mismo es *perpendicular* al borde de la cinta. En la figura 2.11 (a) se muestra la conductancia Hall obtenida para este sistema cuando la caída de potencial se mide entre los cables 2 y 4 (idéntica a la figura 2.10 (d), la cual es equivalente a la medida entre los cables 3 y 5). En contraste, la figura 2.11 (b) presenta la respuesta correspondiente al caso en que el voltaje es medido por cables a diferentes lados del defecto (pares de cables (2,5) o (3,4)). En ambos casos, el sistema utilizado se indica de manera esquemática en los insets de las figuras.

Cuando las sondas de voltaje están ubicadas del mismo lado respecto a la línea de defectos (figura 2.11 (a)), la respuesta Hall observada es independiente de la transmisión entre bordes a través del defecto. Aún más, el valor de la conductancia no-local es idéntico al medido en una muestra de grafeno prístina (como se obtuvo a partir del modelo teórico mínimo en la sección 2.5.1). Por el contrario, cuando la conductancia Hall se mide entre cables localizados en lados opuestos del defecto

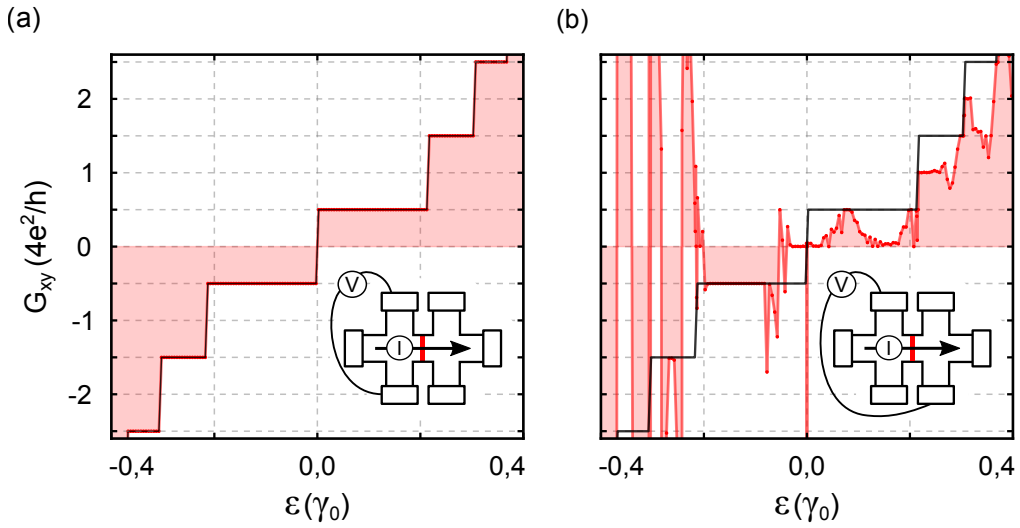


Figura 2.11: Conductancia Hall para una cinta de grafeno prístina (línea negra) y con una línea de defectos tipo 5-8-5 (línea roja con área sombreada por debajo) en configuración *perpendicular* en función de la energía de Fermi. Las sondas de voltaje utilizadas en su medición corresponden a los pares de cables (a) (2,4), y (b) (2,5). Los arreglos geométricos empleados se muestran en los esquemas insertados en cada figura.

lineal (figura 2.11 (b)), la misma se asemeja a la respuesta a dos terminales (figura 2.10 (b)). En este caso, el transporte electrónico se ve fuertemente modificado por la presencia de la línea de defectos en la muestra

La diferencia en la respuesta Hall observada en las figuras 2.11 (a) y (b) para una muestra *perpendicular* tiene su origen en la presencia del defecto lineal en la región central de la cinta (entre los cables 2 y 3, o 4 y 5). En contraste con lo que ocurre en la configuración *paralela*, las mediciones realizadas entre los pares de cables (2,4) y (2,5) no son equivalentes ya que, en el segundo caso, se suma como variable la proporción de electrones cuya trayectoria es deflectada por la línea de defectos. En consistencia con este resultado, se cumple que el agregado de una segunda línea de defectos *perpendicular* a la cinta que puentea los estados de borde en el cable 1 (localizada a la izquierda de los cables 2 y 4), no modifica la conductancia Hall medida entre los cables 2 y 4.

La disparidad en la conductancia no-local del sistema *perpendicular* según la ubicación de las sondas de voltaje, es descripta también por el modelo teórico mínimo correspondiente a un dispositivo de seis terminales con una constricción (sección 2.5.1) [98]. Una fracción de la respuesta Hall medida entre los cables ubicados a lados opuestos del defecto corresponde, de hecho, a la resistencia longitudinal (R_{xx}) no nula propia de la muestra de grafeno con una línea de defectos en la configuración *perpendicular*.

2.6. Desorden y tensión

Hasta la presente sección hemos considerado muestras de grafeno que, excepto por la línea de defectos, pueden considerarse perfectas. Como consecuencia, surge ahora investigar sobre la dependencia del transporte electrónico con el desorden del sistema [176, 185]. Debido a su carácter topológico, los estados de borde quirales de una muestra de grafeno en el régimen Hall cuántico son altamente robustos. Es por esto que tanto la respuesta a dos terminales como la Hall asociadas a los mismos no se ven modificadas por la presencia de defectos o tensión en el sistema. Por el contrario, si bien los nuevos estados de conducción localizados alrededor de la línea de defectos tipo 5-8-5 son semi-quirales, los mismos se encuentran espacialmente próximos entre sí y por ende el comportamiento resultante puede verse alterado por el desorden.

Los defectos lineales presentes en los bordes de grano de muestras de grafeno policristalinas pueden formar una red puenteando los estados de borde quirales [176]. Esto ocurre también en el sistema *perpendicular*, donde una única línea de defectos cortocircuita dichos estados. En la sección 2.5.2 comprobamos que, para este último caso, la respuesta de conductancia no-local depende fuertemente de la ubicación de las sondas de voltaje. Sin embargo, experimentos revelan que en muestras policristalinas aun de gran tamaño (como pueden ser las obtenidas a través de la técnica de deposición química de vapor), los plateaus de conductancia Hall observados son siempre iguales a los del grafeno prístino con desviaciones de hasta un uno por ciento de e^2/h [178]. Una teoría, que a priori parece válida, es que el agregado de desorden en el sistema permita recuperar este resultado para la conductancia no-local.

Probaremos el efecto del desorden de tipo Anderson, vacancias e impurezas de largo alcance en las muestras de grafeno con una línea de defectos *paralela* o *perpendicular*. También analizamos la respuesta obtenida al considerar la tensión que genera dicho defecto lineal en el sistema. En los apartados subsiguientes se detallan los resultados obtenidos para cada tipo de desorden individualmente.

2.6.1. Desorden de Anderson

El desorden de tipo Anderson [186] puede ser interpretado como el cambio de un átomo de carbono por el de otra especie, en una dada concentración. Esto corresponde en el modelo atomístico a la adición de una energía de sitio aleatoria en la red. El valor de la misma es también una variable aleatoria, usualmente tomada como una distribución uniforme dentro del rango $[-U, U]$ donde U mide la fuerza del desorden. [6]

En la figura 2.12 se muestran en línea roja (y con área sombreada por debajo) la conductancia local y no-local para el sistema de grafeno con defecto lineal en configuración *paralela* y *perpendicular* y con desorden de Anderson en dos distribuciones aleatorias diferentes. Para su comparación se presentan también las curvas

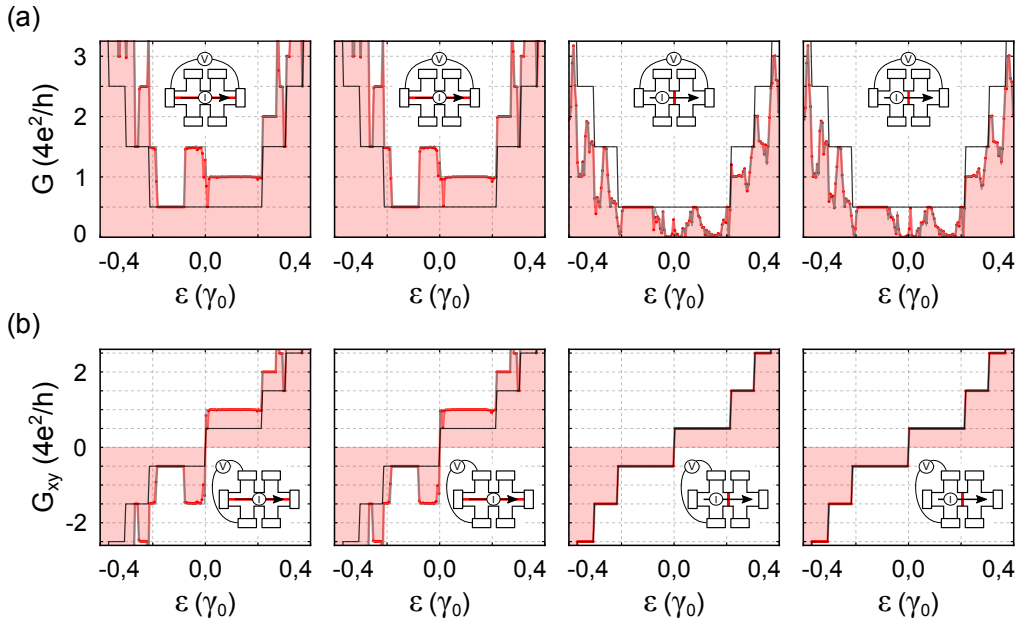


Figura 2.12: (a) Conductancia a dos terminales para una cinta de grafeno con desorden de Anderson en dos distribuciones aleatorias diferentes y con una línea de defectos tipo 5-8-5 (línea roja con área sombreada por debajo) en configuración *paralela* y *perpendicular* en función de la energía de Fermi. Los resultados para muestras prístinas y con el defecto lineal pero sin desorden de Anderson se presentan en línea negra y gris, respectivamente. (b) Conductancia Hall correspondiente a los dispositivos ubicados en la fila superior. Los arreglos geométricos empleados se muestran en los esquemas insertados en cada figura.

correspondientes a las mismas muestras en ausencia de desorden (línea gris) y al grafeno prístino (en negro). Es posible notar que, cuando las energías de sitio fueron elegidas aleatoriamente de entre $\pm 0{,}1\gamma_0$ y con una concentración de $2\,\%$, no se evidencian variaciones significativas en comparación a la respuesta obtenida para el caso sin desorden.

Con respecto a la conductancia no-local (G_{xy}) para un arreglo arbitrario de sondas de voltaje como el que se presenta en la figura 2.11 (b), encontramos que en las muestras con desorden de tipo Anderson no se recupera la respuesta del grafeno prístino en el rango completo de energías investigado. Esto puede observarse en la conductancia local del sistema con configuración *perpendicular* (figura 2.12). El hecho de que esta respuesta sea similar al caso sin desorden, da cuenta de que la resistencia longitudinal para el sistema con desorden es también no nula. Obtener valores para la conductancia Hall que son constantes dentro de un mínimo porcentaje de e^2/h, como se observa en los experimentos [178], puede requerir de una densidad de impurezas muy alta a la cual los estados propagantes alrededor de la línea de defectos tienden a destruirse (concentración mayor al $10\,\%$). Conclusiones similares fueron presentadas por otros autores quienes estudiaron la conductancia a dos terminales de sistemas con desorden de Anderson y defectos del tipo 5-8-5 [176] o bordes de grano más complejos [185]. Sin embargo, un valor de desorden tan alto

puede también demoler los estados de borde topológicos propios del grafeno prístino y por ende los plateaus de conductancia.

2.6.2. Vacancias

Entre los defectos estructurales más comunes en grafeno, el más simple corresponde a la ausencia de átomos en la red cristalina [66]. Al igual que para el desorden de Anderson, la concentración de vacancias en la muestra es una variable de suma importancia a la hora de determinar la respuesta al transporte electrónico en la misma. Por ejemplo, si en una cinta de grafeno prístina en el régimen Hall cuántico hay un número elevado de vacancias, los electrones que se mueven por los estados de borde quirales pueden encontrar un camino para cruzar al borde opuesto modificando tal vez la respuesta Hall (al igual que sucede con el defecto lineal en el sistema *perpendicular*). Por el contrario, cuando la concentración es baja, los estados de borde son robustos y por ende los plateaus en la conductancia no-local permanecen inalterados.

La figura 2.13 presenta las conductancias a dos terminales y Hall para una muestra de grafeno con defecto lineal (en las dos configuraciones estudiadas) y con vacancias en dos distribuciones aleatorias diferentes (línea roja con área sombreada por debajo). Como referencia se exhiben también las curvas correspondientes a las

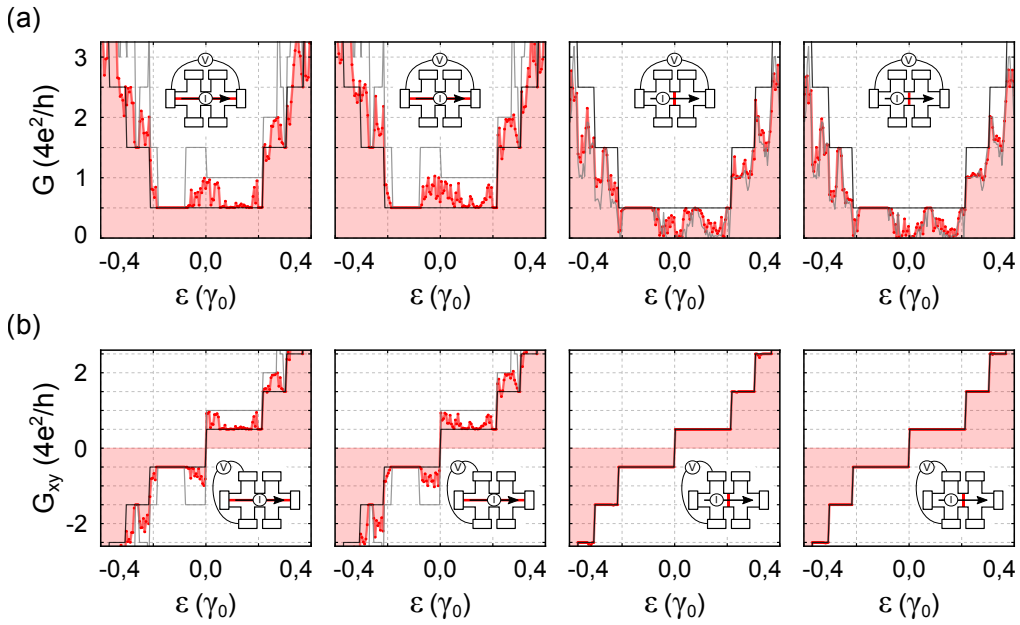


Figura 2.13: (a) Conductancia a dos terminales para una cinta de grafeno con 0,1 % de vacancias en dos distribuciones aleatorias diferentes y con una línea de defectos tipo 5-8-5 (línea roja con área sombreada por debajo) en configuración *paralela* y *perpendicular* en función de la energía de Fermi. Los resultados para muestras prístinas y con el defecto lineal pero sin vacancias se presentan en línea negra y gris, respectivamente. (b) Conductancia Hall correspondiente a los dispositivos ubicados en la fila superior. Los arreglos geométricos empleados se muestran en los esquemas insertados en cada figura.

mismas muestras sin desorden (en gris) y a grafeno prístino (línea sólida negra). Para simular computacionalmente los sistemas con vacancias, en el modelo atomístico se eliminaron aleatoriamente sitios dentro de la cinta con una densidad aproximada de 0,1 %.

La presencia de vacancias en la muestra de grafeno con defecto lineal *paralelo*, induce la ruptura parcial de los plateaus de conductancia agregados por los canales de conducción localizados alrededor del defecto. Este efecto, a comparación del desorden de Anderson, es significativo aun a bajas concentraciones relativas. Por el contrario, en el caso *perpendicular*, la ausencia aleatoria de átomos en la muestra no genera cambios relevantes en las gráficas de G y G_{xy}. La semejanza en la primera de ellas implica que la resistencia longitudinal se encuentra también inalterada y se mantiene no nula. Es por esto que, si bien los plateaus de conductancia Hall permanecen idénticos a los de grafeno prístino, en un arreglo de las sondas de voltaje como el de la figura 2.11 (b) la respuesta es diferente a la del grafeno cristalino. Aun cuando un incremento en la concentración de vacancias podría ayudar a restablecer estos plateaus, también generaría la destrucción de los estados de borde quirales propios del grafeno.

2.6.3. Impurezas de largo alcance

Un tercer tipo de desorden que puede ser incorporado al sistema es el de impurezas de largo alcance. Las mismas pueden generarse por efectos del sustrato (ya sea por la presencia de cargas u otras características que generan un potencial que varía lentamente), por scattering con impurezas cargadas y por arrugamientos aleatorios de la muestra, entre otros. A nivel teórico se diferencia de los desórdenes anteriores en que, debido a su extensión en la muestra, posibilita la existencia de procesos de dispersión dentro de cada valle (K o K') [187-189]. De esta manera, se abre un nuevo abanico de respuestas al transporte electrónico en las muestras de grafeno con una línea de defectos.

Las conductancias locales y no-locales para los distintos sistemas estudiados y con desorden de largo alcance en dos distribuciones aleatorias diferentes se muestran en la figura 2.14 (línea roja con área sombreada por debajo). Al igual que en los casos anteriores, se presentan también las curvas asociadas a las mismas muestras sin desorden (en gris) y las de grafeno prístino (línea negra). Particularmente, los casos ilustrados corresponden a impurezas de tipo gaussianas, las cuales se incorporan al modelo a través de la modulación de las energías de sitio con un perfil gaussiano [6, 188, 190]. La intensidad de las mismas (U) se elige aleatoriamente de entre $\pm 0{,}2\gamma_0$ y su longitud de decaimiento (σ) es igual a $15a$. Éstas se localizan alrededor del defecto, a una distancia máxima de 3σ, donde su efecto sobre el transporte eléctronico es máximo. Específicamente, para la configuración *paralela*, cuatro impurezas se ubicaron aleatoriamente en un área de $350a$ por $120a$ (8σ) alrededor del defecto lineal. En el caso *perpendicular*, el área elegida fue de $62a$ por $120a$ (8σ) en el centro de la cinta.

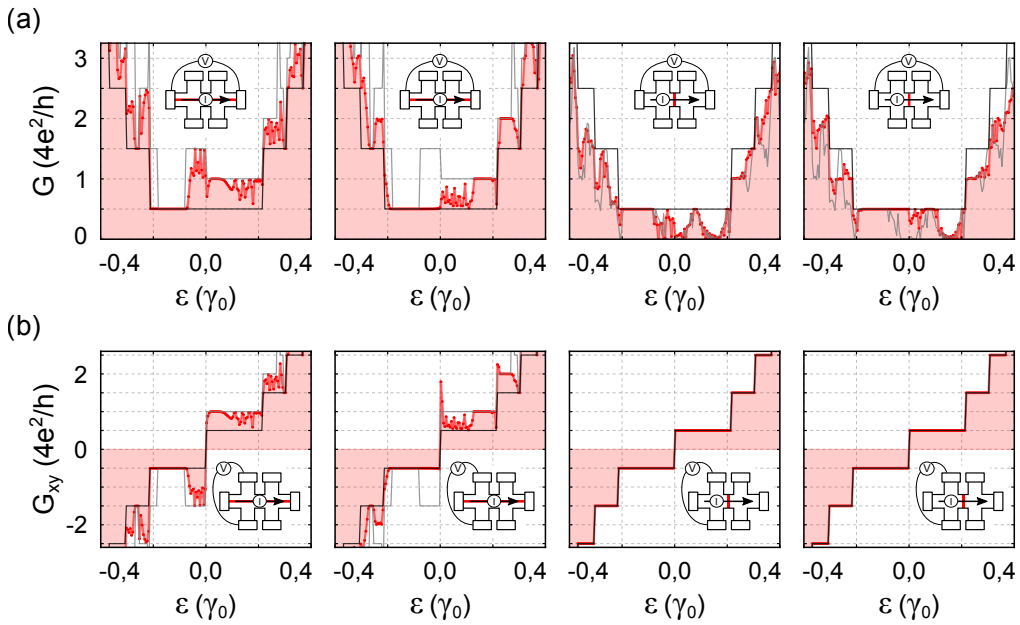


Figura 2.14: (a) Conductancia a dos terminales para una cinta de grafeno con impurezas de largo alcance en dos distribuciones aleatorias diferentes y con una línea de defectos tipo 5-8-5 (línea roja con área sombreada por debajo) en configuración *paralela* y *perpendicular* en función de la energía de Fermi. Los resultados para muestras prístinas y con el defecto lineal pero sin impurezas de largo alcance se presentan en línea negra y gris, respectivamente. (b) Conductancia Hall correspondiente a los dispositivos ubicados en la fila superior. Los arreglos geométricos empleados se muestran en los esquemas insertados en cada figura.

En la figura 2.14 observamos que los plateaus de conductancia Hall (cuyos orígenes son los estados localizados alrededor de la línea de defectos) desaparecen parcialmente para el sistema *paralelo*. Sin embargo, y de igual manera que para el desorden de tipo Anderson y las vacancias, no se recupera la respuesta del grafeno monocristalino. En cuanto a la muestra *perpendicular*, el resultado también es equivalente al obtenido en los dos casos previos. Particularmente, no se evidencian cambios significativos en las curvas de conductancia respecto de las muestras sin impurezas. Por lo tanto, podemos concluir que ni desórdenes puntuales (como Anderson o vacancias) ni de largo alcance (impurezas gaussianas) en una concentración moderada, permiten explicar los resultados obtenidos experimentalmente para muestras de grafeno policristalinas (con una red de bordes de grano) donde se recupera con gran exactitud la respuesta Hall del grafeno prístino [178].

2.6.4. Tensión

Dada la alta concentración de desorden necesaria para recuperar los plateaus en la conductancia no-local, podemos cuestionarnos si existe otro factor que incida en dicha restauración. Es por esto que investigamos el efecto de la tensión mecánica aplicada alrededor de la línea de defectos. Hasta el momento asumimos que la presencia de la misma sólo generaba un cambio en la topología de la red. Sin

embargo, esta deformación de la cinta genera también una cierta tensión sobre los átomos próximos debido a la deformación de las distancias y ángulos de enlace respecto de los ideales.

Las conductancias a dos terminales y Hall de una muestra de grafeno sujeta a una tensión perpendicular a la línea de defectos se presentan en línea roja (con área sombreada por debajo) en la figura 2.15. En ésta se incluyen también las curvas que corresponden a las conductancias del sistema en ausencia de tensión (línea gris) y del grafeno monocristalino (en negro), para una comparación más sencilla. La perturbación se incorpora al modelo atomístico como una corrección en el valor

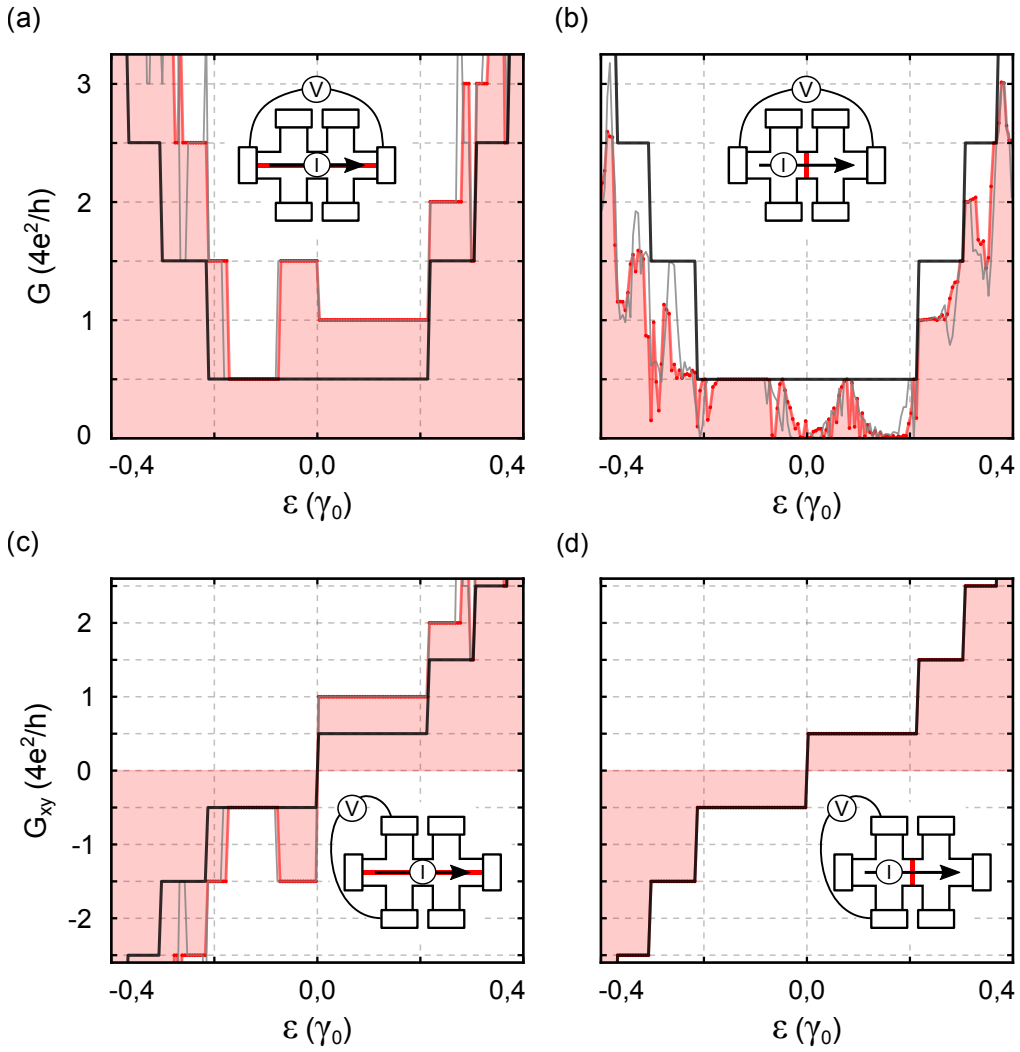


Figura 2.15: Conductancia a dos terminales para una cinta de grafeno con una línea de defectos tipo 5-8-5 (línea roja con área sombreada por debajo) en configuración (a) *paralela* y (b) *perpendicular* y bajo tensión perpendicular a la misma en función de la energía de Fermi. Los resultados para muestras prístinas y con el defecto lineal pero sin tensión se presentan en línea negra y gris, respectivamente. (c), (d) Conductancia Hall correspondiente a los dispositivos ubicados en la fila superior. Los arreglos geométricos empleados se muestran en los esquemas insertados en cada figura.

del elemento de matriz de hopping de hasta 5 % en el centro de la línea de defectos, el cual decae a su valor original en un par de constantes hacia los bordes de la cinta [191].

En la figura 2.15 queda en evidencia que, tanto para el sistema *paralelo* como para el *perpendicular*, la incorporación de tensión perpendicular a la línea de defectos no genera cambios relevantes en las conductancias. Nuevamente, este efecto no permite justificar los valores de conductancia obtenidos experimentalmente para muestras policristalinas de grafeno. Por otra parte, este resultado valida también la suposición realizada con anterioridad (sección 2.2) en la cual consideramos que la incorporación de la línea de defectos tipo 5-8-5 a la cinta de grafeno sólo modifica la topología de la red.

2.7. Defecto lineal tipo 5-7-7-5 (Stone-Wales)

En las secciones previas se analizó el efecto de la incorporación de una línea de defectos tipo 5-8-5 en una cinta de grafeno. Podemos preguntarnos entonces acerca de la dependencia de estos resultados con los detalles microscópicos del defecto. Para ello, consideramos un segundo defecto lineal como es el de Stone-Wales. El mismo fue descubierto en el contexto de los fulerenos (moléculas formadas completamente por átomos de carbono con geometría esférica, elipsoidal o tubular) por Anthony Stone y David J. Wales [192], quienes le dan hoy el nombre.

El defecto de Stone-Wales es también conocido como defecto tipo 5-7-7-5 debido a las figuras geométricas que presenta (de manera análoga al tipo 5-8-5). Un enlace carbono-carbono en la red de grafeno rota 90 grados de manera tal que cuatro hexágonos vecinos se transforman en dos pentágonos y dos heptágonos (figura 2.16). Cuando esta rotación ocurre en pares de átomos separados por dos constantes de red, se obtiene finalmente una línea de defectos extendida.

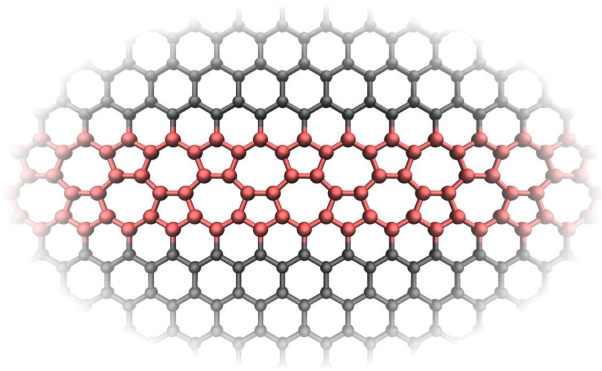


Figura 2.16: Esquema de una cinta de grafeno con una línea de defectos tipo 5-7-7-5 marcada en rojo.

2.7.1. Modelo atomístico

El modelo atomístico de la muestra de grafeno con un defecto lineal de Stone-Wales no presenta mayores modificaciones respecto al correspondiente a la línea de defectos tipo 5-8-5. Al igual que en el caso anterior, podemos asumir que este defecto sólo introduce cambios en la topología de la red (pentágonos y heptágonos por hexágonos), despreciando tanto las correcciones en las energías de sitio como en los elementos de matriz de hopping.

El sistema considerado en esta sección corresponde a una cinta de grafeno con bordes zigzag en presencia de una línea de defectos tipo 5-7-7-5. Análogamente al caso del sistema con un defecto lineal 5-8-5, se analizan dos posibles configuraciones: una *paralela*, donde el defecto es paralelo al borde de la cinta, y otra *perpendicular*, en la cual el mismo atraviesa la muestra puenteando bordes opuestos. Para conocer la respuesta del transporte electrónico en el régimen Hall cuántico, se incorpora un campo magnético externo mediante la sustitución de Peierls [179]. Los dispositivos estudiados son del tipo "todo carbono" donde tanto la muestra como los cables empleados como sondas de voltaje y de corriente son de grafeno. Por último, los parámetros utilizados en las simulaciones computacionales son idénticos a los escogidos en el estudio del defecto lineal tipo 5-8-5 (sistemas de ancho $W_1 = 37{,}4$ nm y $W_2 = 24{,}8$ nm, sujetos a un flujo magnético de 0,013 Φ_0 por plaqueta).

2.7.2. Estructura electrónica

La estructura electrónica para grafeno zigzag con una línea de defectos de Stone-Wales se presenta en la figura 2.17 (b). Al igual que para el defecto tipo 5-8-5, ésta corresponde al sistema en configuración *paralela* donde se mantiene la invarianza traslacional en la dirección de crecimiento de la cinta (y por ende puede ser empleado el Teorema de Bloch). En la figura los círculos llenos corresponden a estados con peso (w) en los sitios que se encuentran a una distancia máxima $2a$ desde el centro del defecto (figura 2.17 (a)), y donde la magnitud de dicho peso está codificada en la escala de color.

La figura 2.17 (b) muestra la misma información espectral que la figura 2.4 (b) para el caso de una línea de defectos tipo 5-8-5. Podemos notar que en ambas las características del grafeno entran sólo a través de la estructura de niveles de Landau (se observan en la gráfica en puntos grises pequeños). Particularmente, se destacan la presencia de un nivel de Landau a energía cero y el espaciado característico entre niveles sucesivos.

Por otra parte, en la estructura electrónica queda en evidencia la ruptura de la simetría electrón-hueco (simetría respecto de $\varepsilon = 0$). De igual manera que para el defecto tipo 5-8-5, ésta tiene su origen en el quiebre de la naturaleza bipartita de la red por la presencia del defecto lineal. Específicamente, se observa la existencia de bandas asociadas a estados localizados alrededor de la línea de defectos (puntos

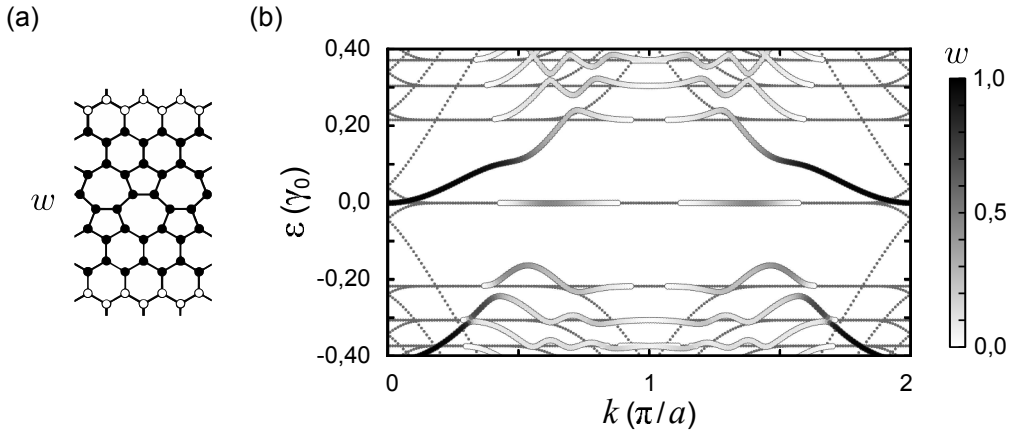


Figura 2.17: (a) Esquema de la línea de defectos tipo 5-7-7-5 donde los sitios que se consideraron para el cálculo del peso (w) se encuentran marcados en negro. (b) Estructura electrónica para una cinta de grafeno con bordes zigzag y con un defecto lineal 5-7-7-5 en configuración *paralela*. Los estados cuyo peso (módulo de la amplitud de probabilidad al cuadrado) es mayor a 0,01 en los átomos alrededor del defecto se muestran con una escala de color desde blanco ($w = 0$) a negro ($w = 1$).

rellenos cuyo color está dado por la escala adjunta). Si bien estos estados se asemejan a los de borde en una muestra de grafeno prístina, en el sentido de que presentan una velocidad neta, no son quirales. Debido a la hibridización de los mismos, el peso neto a ambos lados del defecto es no nulo. Para ciertas energías, sin embargo, existe una dirección preponderante de movimiento de los electrones a cada lado del defecto. Esto se pone en evidencia en las figuras 2.18 (b) y (c), donde la escala de color da cuenta de la diferencia de peso de los estados entre la mitad superior e inferior del defecto (figura 2.18 (a)).

Al comparar las estructuras electrónicas de las figuras 2.4 y 2.17, notamos que se generan estados de borde localizados alrededor de la línea de defectos independientemente del tipo de la misma. Además, si bien se observan cambios en las bandas correspondientes al defecto lineal, en ambos casos existen regiones de energía donde presentan un gap (debido a la hibridización de los estados ubicados a cada lado de la línea). La existencia de estos gaps es de interés ya que, a dichas energías, el transporte electrónico será idéntico al que se observa en el grafeno prístino. De esta manera es posible, por ejemplo, diseñar un divisor de haces electrónico que presente las categorías “apagado” y “encendido”. En conclusión, las características generales de la estructura electrónica de una cinta de grafeno zigzag con una línea de defectos no se ven modificadas por los detalles microscópicos de la misma.

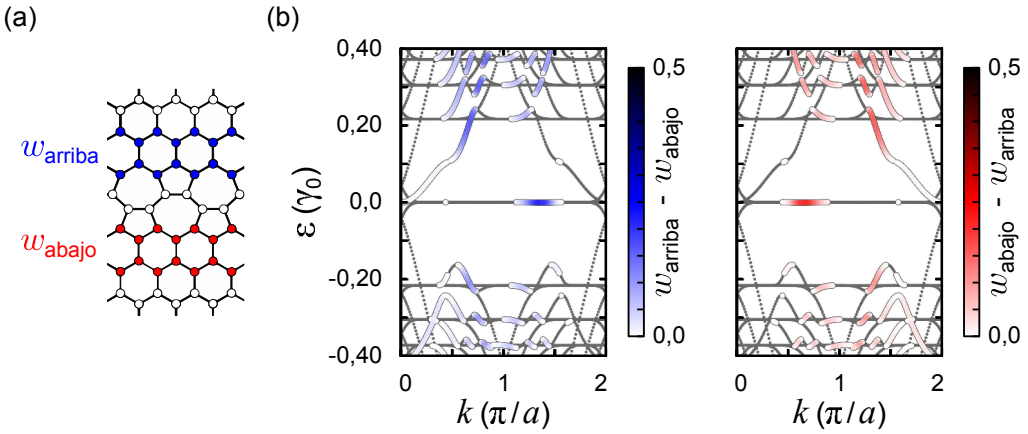


Figura 2.18: (a) Esquema de la línea de defectos tipo 5-7-7-5 donde los sitios que se consideraron para el cálculo de los pesos w_{arriba} y w_{abajo} se encuentran marcados en azul y rojo, respectivamente. (b) Estructura electrónica para una cinta de grafeno con bordes zigzag y con un defecto lineal 5-7-7-5 en configuración *paralela*. Los estados localizados predominantemente en la parte superior e inferior de la línea de defectos (con pesos $w_{arriba} - w_{abajo}$ y $w_{abajo} - w_{arriba}$ mayores a 0,01) se muestran con una escala de color desde blanco ($w = 0$) a negro ($w = 0{,}5$) atravesando por los azules y rojos, respectivamente.

2.7.3. Transporte electrónico

A partir del análisis de las curvas de conductancia para la cinta de grafeno con una línea de defectos tipo 5-8-5 (sección 2.5), podría inferirse que las respuestas local y Hall no dependen, en gran medida, de las particularidades del defecto. De hecho, en el modelo teórico mínimo propuesto (sección 2.5.1), el principal factor considerado es el arreglo geométrico de los cables y la línea de defectos. Por el contrario, los detalles microscópicos de esta última sólo están involucrados en la dependencia de la matriz de transmisión con la energía. Las particularidades de la línea de defectos inciden principalmente en los detalles de la respuesta observada, como por ejemplo, en la ubicación precisa de la energía a la cual nuevos plateaus aparecen en la conductancia no-local.

Con el objetivo de corroborar esta intuición, repetimos las simulaciones para una cinta de grafeno zigzag pero con una línea de defectos tipo Stone-Wales. En la figura 2.19 se muestran, en línea roja y con el área por debajo sombreada, las conductancias a dos terminales y Hall para el sistema con configuración *paralela* y *perpendicular* (se incluyen también en línea negra las correspondientes al grafeno prístino como referencia). Comparando con las curvas correspondientes al defecto tipo 5-8-5 (figura 2.10), podemos ver que el análisis realizado es equivalente excepto por los detalles de la estructura de bandas que impactan en las variaciones de G (figuras 2.19 (a) y (b)).

Particularmente, para el sistema *paralelo*, se visualizan nuevos plateaus en las conductancias a dos terminales y Hall (propios del transporte balístico) salvo en la zona donde la densidad local de estados alrededor del defecto es nula. Por su parte,

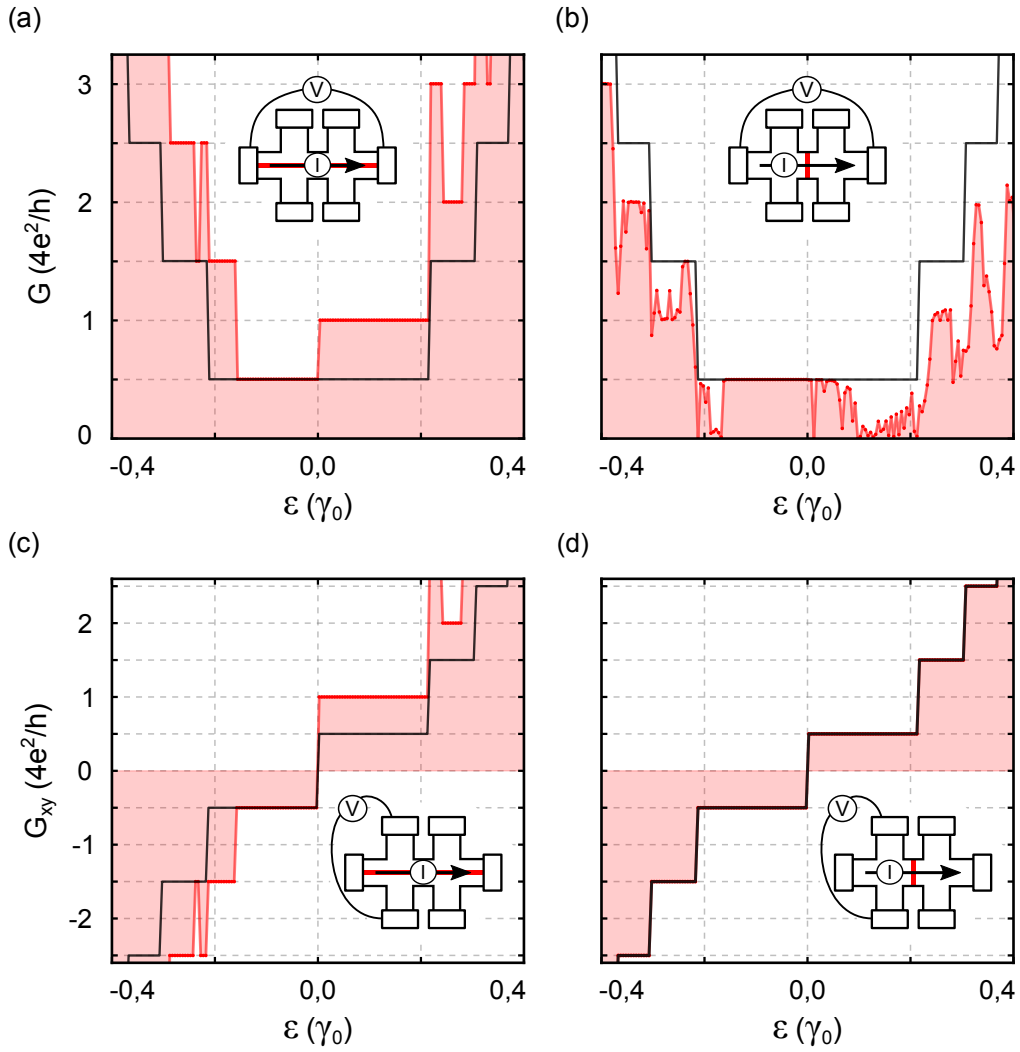


Figura 2.19: Conductancia a dos terminales para una cinta de grafeno prístina (línea negra) y con una línea de defectos tipo 5-7-7-5 (línea roja con área sombreada por debajo) en configuración (a) *paralela* y (b) *perpendicular* en función de la energía de Fermi. La conductancia Hall correspondiente a los mismos dispositivos se presenta en (c) y (d), respectivamente. Los arreglos geométricos empleados se muestran en los esquemas insertados en cada figura.

en el caso de la configuración *perpendicular*, vemos que la respuesta local se ve fuertemente deteriorada por la presencia del defecto lineal mientras que la no-local es análoga a la del grafeno prístino. Además, se observa que este sistema se comporta como un divisor de haces, donde hay un estado apagado y uno encendido, los cuales pueden ser intercambiados mediante la aplicación de un potencial eléctrico externo perpendicular a la muestra.

Por lo tanto, podemos afirmar que las principales conclusiones obtenidas previamente son válidas también para el sistema con una línea de defectos tipo Stone-Wales. Esto implica que los detalles microscópicos del defecto sólo están involucrados en algunas características puntuales (como por ejemplo el grado de deterioro de la

conductancia a dos terminales en el sistema *perpendicular*). Es interesante resaltar que la quiralidad de los estados propagantes cerca del defecto no participa en ningún grado en este análisis. Por último, si bien consideramos sólo dos tipos de defectos lineales (5-8-5 y 5-7-7-5), se espera que la misma física sea válida para otros tipos de líneas de defecto y bordes de grano.

2.8. A modo de resumen

En una muestra de grafeno monocristalina pueden encontrarse diferentes tipos de defectos. En particular, aquellos extendidos a lo largo de una línea han suscitado, en los últimos años, un gran interés debido a que se encuentran naturalmente en los bordes de grano de muestras policristalinas y que también pueden ser producidos a medida. En el presente capítulo nos centramos en el estudio de las conductancias locales y no-locales de grafeno con una única línea de defectos en el régimen Hall cuántico. Estos resultados sirven como punto de partida para la comprensión de la respuesta medida experimentalmente en grafeno policristalino. Analizamos además el efecto del desorden (Anderson, vacancias o impurezas de largo alcance), la tensión y los detalles microscópicos del defecto lineal.

Usando un modelo atomístico y realizando simulaciones computacionales, se mostró que el defecto afecta de manera diferente la conductancia a dos terminales y Hall dependiendo principalmente del arreglo geométrico del dispositivo. Si la línea de defectos es *paralela* a los bordes de la muestra, se comprobó que el sistema se comporta de manera análoga a un circuito formado por resistores en paralelo. Por el contrario, cuando el defecto une bordes opuestos puenteándolos, la respuesta a dos terminales se ve fuertemente deteriorada mientras que la Hall puede permanecer inalterada según la ubicación de las sondas de voltaje y corriente. Estos resultados se corroboraron mediante el planteo de un modelo teórico mínimo utilizando el formalismo de Landauer-Büttiker. El sistema *perpendicular* actúa como el análogo eléctrico de un divisor de haces en óptica. Los estados de borde topológicos (y quirales) propios del grafeno prístino se pueden reencaminar variando la energía del sistema, o equivalentemente, encendiendo y apagando arbitrariamente el divisor.

El estudio de una única línea de defectos es el punto de partida para la comprensión de la respuesta medida experimentalmente en grafeno policristalino. En este último caso, la conductancia Hall es idéntica a la correspondiente a grafeno prístino en una fase tipo Hall cuántica (con una variación menor al uno por ciento de e^2/h) [178]. Sin embargo, en el presente capítulo observamos que no se recupera esta respuesta para el caso de un arreglo arbitrario de las sondas de voltaje respecto del defecto lineal. Se probó entonces agregando desorden puntual, de largo alcance, y tensión al sistema, pero los nuevos canales de conducción que se localizan alrededor de la línea del defecto no se destruyeron en su totalidad cuando la concentración del desorden fue moderada. Estos resultados demuestran que puede resultar complejo recuperar la conductancia del grafeno prístino. Por último se

comprobó que los detalles microscópicos de la línea de defectos no modifican los rasgos generales de las curvas de conductancia local y no-local. Por todo lo anterior, el rol de los defectos lineales en geometrías más complejas (como las encontradas en muestras policristalinas) es un área de interés abierta a mayor estudio.

Los resultados aquí presentados fueron publicados en el siguiente trabajo: V. Dal Lago y L. E. F. Foa Torres, «Line defects and quantum Hall plateaus in graphene», Journal of Physics: Condensed Matter **27**, 145303 (2015).

CAPÍTULO 3

ESTADOS TOPOLÓGICOS EN EL MODELO SSH FORZADO

La dirección y manipulación de los estados de borde de un aislante topológico pueden llevarse a cabo de diferentes maneras. Una de ellas es mediante la modificación de la topología de la red, lo que conlleva una ruptura de la simetría de inversión (capítulo 2) [72]. También es posible interactuar con los estados topológicos empleando una perturbación dependiente del tiempo [117, 129, 193, 194]. En particular, podemos comenzar estudiando qué ocurre en uno de los aislantes topológicos más sencillos como es el poliacetileno dimerizado, un sistema unidimensional [195-197].

En 1977, Hideki Shirakawa, Alan J. Heeger y colaboradores descubrieron el primer polímero conductor: el poliacetileno dimerizado derivatizado con halógenos [198] (lo que les valió el premio Nobel de química en el año 2000 [149]). Un par de años después, Alan J. Hegger junto a Wu-Pei Su y John R. Schrieffer propusieron un modelo simple de tipo tight-binding para el poliacetileno dimerizado que explica las características eléctricas de este material. Actualmente el mismo se conoce como modelo SSH en honor a sus autores [145].

El modelo SSH probó ser también un ejemplo mínimo de un aislante topológico [146, 147]. Éste presenta dos fases topológicas diferentes: una trivial que se caracteriza por la ausencia de estados de borde, y otra no trivial (o también llamada topológica) que sí los presenta (sección 1.2.6). Dicho carácter queda definido por la relación entre las fuerzas relativas de los acoplamientos dentro (γ_1) y fuera (γ_2) de la celda unidad (la cual está compuesta por dos átomos, figura 3.1). Específicamente, cuando $|\gamma_1/\gamma_2| < 1$ el material se encuentra en la fase topológica, pero si $|\gamma_1/\gamma_2| > 1$ la fase es trivial. De hecho, podemos vaticinar este resultado si pensamos en un caso extremo donde uno de los dos hoppings es nulo: si $\gamma_1 = 0$ existe un átomo aislado en cada extremo de la cadena, lo que se corresponde con dos estados localizados en los bordes polarizados en subredes opuestas; mientras que si $\gamma_2 = 0$ el sistema está conformado por celdas unidades completas separadas entre sí.

La pregunta que surge entonces es cómo se ven alteradas las características topológicas si incorporamos al modelo SSH una perturbación dependiente del tiempo ya sea en la energía de los sitios o en los hoppings. Considerando que las fases

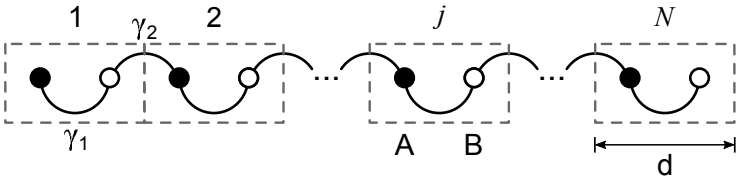


Figura 3.1: Esquema del modelo de Su-Schrieffer-Heeger con los sitios de tipo A marcados en negro y B en blanco. Se considera una sección finita del modelo formada por N celdas unidad de ancho d, y donde γ_1 y γ_2 representan los acoplamientos dentro y fuera de la celda unidad, respectivamente.

topológicas están dadas por la relación de los acoplamientos, podemos conjeturar a priori que en el primer caso no se modificará la del modelo de partida. Sin embargo, cuando la modulación incide sobre el valor de los hoppings, además de los nuevos gaps que se pueden abrir en la estructura de bandas [116, 140], la topología del gap nativo puede verse modificada. Por ejemplo, si partimos de la cadena sin dimerizar (donde $\gamma_1 = \gamma_2$) y agregamos la modulación temporal, la relación $|\gamma_1/\gamma_2|$ cambia de manera tal que "fotos" tomadas en distintos momentos reflejan un ida y vuelta entre un aislante topológico y uno trivial.

En el presente capítulo analizamos el efecto de una perturbación periódica en el tiempo en el modelo SSH, proveyendo así un caso sencillo de un aislante topológico forzado. Específicamente estudiamos cómo el espectro de energías se ve afectado por el potencial dependiente del tiempo, examinando tanto la estructura de bandas, la presencia de estados de borde y el invariante topológico asociado (fase de Zak [107]). Debido al carácter periódico de la modulación temporal, podemos emplear en el análisis del problema la teoría de Floquet [120, 199, 200]. Estos resultados complementan trabajos previos sobre sistemas unidimensionales forzados desarrollados en una variedad de contextos [122, 135, 201, 202].

3.1. Teoría de Floquet

En mecánica cuántica la evolución temporal de un sistema está dada por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo [203]:

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) \;=\; \mathcal{H}(\boldsymbol{r},t)\;\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{3.1}$$

donde $\mathcal{H}$ corresponde al Hamiltoniano y $\psi(\boldsymbol{r},t)$ a la función de onda del sistema cuántico dependiente del tiempo, y $\boldsymbol{r}$ es un vector que incluye todas las coordenadas espaciales y la componente de spin. La resolución de esta ecuación para un sistema real puede presentar un alto grado de complejidad. Es por esto que, generalmente, la misma se realiza considerando el límite adiabático, aquel donde la dependencia temporal del Hamiltoniano varía mucho más lentamente que los tiempos característicos del sistema [204].

En esta tesis nos centramos en estudiar sistemas forzados de manera periódica. Para conocer el régimen de adiabaticidad en el cual se encuentran, deberíamos comparar el período de la modulación (T) con un tiempo característico del sistema como puede ser el tiempo de pasaje electrónico por el mismo. Sin embargo, nos interesa encontrar una solución válida más allá del límite adiabático, para situaciones donde no es posible despreciar el intercambio de energía con el campo externo. Planteamos entonces un enfoque diferente donde, aprovechando la periodicidad temporal de la perturbación externa, empleamos la teoría de Floquet [6, 199, 200].

Marie Gaston Floquet fue un matemático francés dedicado al estudio de la teoría de ecuaciones diferenciales ordinarias. En 1883 publicó un trabajo en el cual plantea las soluciones analíticas para ecuaciones diferenciales lineales homogéneas de coeficientes uniformes y periódicos [120]. Posteriormente, Jon H. Shirley y Hideo Sambe extendieron este teorema al área de la física para la resolución de Hamiltonianos dependientes del tiempo de manera periódica [205, 206]. A partir del mismo es posible entonces encontrar las soluciones al problema de autovalores de $\mathcal{H}(t)$. El formalismo de Floquet es el análogo en la dimensión temporal al teorema de Bloch para electrones en un cristal perfecto con periodicidad espacial [81].

3.1.1. Formalismo de Floquet

Dado un Hamiltoniano periódico en el tiempo, $\mathcal{H}(\boldsymbol{r}, t+T) = \mathcal{H}(\boldsymbol{r}, t)$, asumimos que existe un conjunto completo de soluciones del sistema de la forma [205, 206]

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = e^{-i\varepsilon t/\hbar}\, \phi(\boldsymbol{r}, t) \tag{3.2}$$

donde la función $\phi(\boldsymbol{r}, t) = \phi(\boldsymbol{r}, t+T)$ es una función periódica cuadrado integrable (con igual período T que el Hamiltoniano), y ε un número real. En dicha solución, la dinámica temporal rápida del sistema está incluída en la función $\phi(\boldsymbol{r}, t)$; mientras que la lenta se encuentra descripta por el factor exponencial.

Reemplazando la función de onda propuesta (ecuación 3.2) en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (ecuación 3.1) obtenemos:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left[e^{-i\varepsilon t/\hbar}\, \phi(\boldsymbol{r}, t)\right] &= \mathcal{H}(\boldsymbol{r}, t)\, \left[e^{-i\varepsilon t/\hbar}\, \phi(\boldsymbol{r}, t)\right] \\
e^{-i\varepsilon t/\hbar}\, \left[\varepsilon\, \phi(\boldsymbol{r}, t) + i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\phi(\boldsymbol{r}, t)\right] &= e^{-i\varepsilon t/\hbar}\, \mathcal{H}(\boldsymbol{r}, t)\, \phi(\boldsymbol{r}, t) \\
e^{-i\varepsilon t/\hbar}\, \varepsilon\, \phi(\boldsymbol{r}, t) &= e^{-i\varepsilon t/\hbar}\, \left[\mathcal{H}(\boldsymbol{r}, t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right] \phi(\boldsymbol{r}, t)
\end{aligned}$$

lo que corresponde a resolver el problema de autovalores

$$\left[\mathcal{H}(\boldsymbol{r}, t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right] \phi(\boldsymbol{r}, t) = \varepsilon\, \phi(\boldsymbol{r}, t) \tag{3.3}$$

equivalente al de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, $\mathcal{H}(\boldsymbol{r})\,\psi(\boldsymbol{r}) = \varepsilon\,\psi(\boldsymbol{r})$. Podemos definir entonces el Hamiltoniano de Floquet como

$$\mathcal{H}_F(\boldsymbol{r},t) = \mathcal{H}(\boldsymbol{r},t) \;-\; \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{3.4}$$

y a las funciones $\phi(\boldsymbol{r},t)$ como los estados de Floquet asociados. Éstos pertenecen al espacio de Floquet de producto directo $\mathscr{R}\otimes\mathscr{T}$, donde $\mathscr{R}$ es el espacio de Hilbert usual, y $\mathscr{T}$ el espacio de las funciones periódicas en el tiempo con período $T = 2\pi/\Omega$ [206]. Comparando la ecuación 3.3 con la de Schrödinger independiente del tiempo resulta evidente que el autovalor (ε) en la primera cumple el rol de la energía en la segunda. Es por esto que ε se denomina cuasienergía.

En el teorema de Bloch para cristales con periodicidad espacial, el cuasimomento $\boldsymbol{k}$ (factor del exponente de la función exponencial que multiplica a la función de Bloch en la solución del sistema) está acotado a la primera zona de Brillouin. De manera análoga podemos probar que las cuasienergías en el formalismo de Floquet también están restringidas. Partimos de la base de que tanto el sistema como las funciones de onda $\psi(\boldsymbol{r},t)$ solución de la ecuación 3.1 presentan simetría de traslación temporal. Esto implica que las mismas deben ser invariantes ante traslaciones temporales en $T = 2\pi/\Omega$ a menos de una fase, es decir $\psi(\boldsymbol{r},t+T) = e^{-\mathrm{i}\varepsilon T/\hbar}\;\psi(\boldsymbol{r},t)$. Considerando que $e^{-\mathrm{i}n\Omega T} = 1$, con $n \in \mathbb{Z}$, tenemos que $e^{-\mathrm{i}\varepsilon T/\hbar} = e^{-\mathrm{i}(\varepsilon+n\hbar\Omega)T/\hbar}$. Podemos definir entonces

$$\varepsilon_n = \varepsilon + n\hbar\Omega \tag{3.5}$$

de manera tal que las cuasienergías quedan restringidas al intervalo $(-\hbar\Omega/2,\ \hbar\Omega/2)$. Esta multiplicidad se refleja en la estructura de bandas como la réplica de ε desplazada en energía en $\hbar\Omega$ (y sus respectivos múltiplos). Luego, tal como se observa en la figura 3.2, el espectro de Floquet de cuasienergías es periódico.

3.1.2. Formalismo de Floquet en forma matricial

La solución dada por la teoría de Floquet no sólo es no perturbativa y válida para tiempos largos, sino que principalmente es exacta. Sin embargo, para simplificar la resolución del problema, es conveniente eliminar de manera explícita la dependencia temporal del Hamiltoniano y de los estados de Floquet asociados [205, 206].

Para arribar a una expresión estática (independiente del tiempo) es necesario realizar primero un cambio de base adecuado, expandiendo $\mathcal{H}(\boldsymbol{r},t)$ y $\phi(\boldsymbol{r},t)$ en series de Fourier. Específicamente empleamos la base $\{\exp(\mathrm{i}n\Omega t)\}_n$ que expande el espacio $\mathscr{T}$ de las funciones temporales de período $T = 2\pi/\Omega$:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}(\boldsymbol{r},t) &= \sum_k \mathcal{H}^k(\boldsymbol{r})\;e^{\mathrm{i}k\Omega t}\\ \phi(\boldsymbol{r},t) &= \sum_m \phi^m(\boldsymbol{r})\;e^{\mathrm{i}m\Omega t}\end{aligned} \tag{3.6}$$

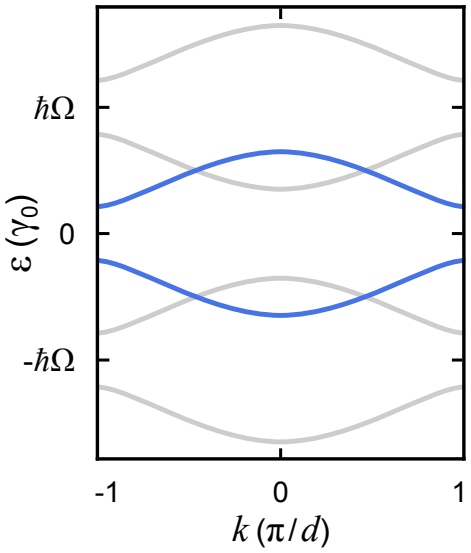


Figura 3.2: Esquema de cuasienergías del modelo SSH donde se observan las réplicas de Floquet con $n = -1$, $n = 0$ (en azul) y $n = 1$. Las mismas están centradas en energía $\varepsilon = -\hbar\Omega$, $\varepsilon = 0$, $\varepsilon = \hbar\Omega$, respectivamente.

donde $\mathcal{H}^n(\boldsymbol{r})$ y $\phi^n(\boldsymbol{r})$ son las componentes n-ésimas de la serie de Fourier del Hamiltoniano y de los estados de Floquet asociados, respectivamente. Sustituyendo estas expresiones (ecuación 3.6) en la función de onda (ecuación 3.2) y luego en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (ecuación 3.1) obtenemos:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left[e^{-i\varepsilon t/\hbar} \sum_{m'} \phi^{m'}(\boldsymbol{r})\, e^{im'\Omega t}\right] = \left[\sum_k \mathcal{H}^k(\boldsymbol{r})\, e^{ik\Omega t}\right]\left[e^{-i\varepsilon t/\hbar} \sum_m \phi^m(\boldsymbol{r})\, e^{im\Omega t}\right]$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left[\sum_{m'} \phi^{m'}(\boldsymbol{r})\, e^{im'\Omega t}\, e^{-i\varepsilon t/\hbar}\right] = \sum_k \sum_m \mathcal{H}^k(\boldsymbol{r})\, e^{ik\Omega t}\, \phi^m(\boldsymbol{r})\, e^{im\Omega t} e^{-i\varepsilon t/\hbar}$$

$$i\hbar \left[\sum_{m'} \phi^{m'}(\boldsymbol{r})\, e^{im'\Omega t}\, e^{-i\varepsilon t/\hbar}\left(im'\Omega - i\varepsilon/\hbar\right)\right] = \sum_k \sum_m \mathcal{H}^k(\boldsymbol{r})\, \phi^m(\boldsymbol{r})\, e^{i(k+m)\Omega t} e^{-i\varepsilon t/\hbar}$$

$$e^{-i\varepsilon t/\hbar} \sum_{m'} \phi^{m'}(\boldsymbol{r})\, e^{im'\Omega t}\left(-m'\hbar\Omega + \varepsilon\right) = e^{-i\varepsilon t/\hbar} \sum_k \sum_m \mathcal{H}^k(\boldsymbol{r})\, \phi^m(\boldsymbol{r})\, e^{i(k+m)\Omega t}$$

$$\sum_{m'} \phi^{m'}(\boldsymbol{r})\, e^{im'\Omega t}\left(-m'\hbar\Omega + \varepsilon\right) = \sum_k \sum_m \mathcal{H}^k(\boldsymbol{r})\, \phi^m(\boldsymbol{r})\, e^{i(k+m)\ \Omega t}$$

Integrando sobre un período de tiempo, podemos determinar los coeficientes de las series de Fourier:

$$\frac{1}{T}\int_0^T \sum_{m'} \phi^{m'}(\boldsymbol{r})\, e^{im'\Omega t}\left(-m'\hbar\Omega + \varepsilon\right) e^{-in\Omega t} dt =$$

$$= \frac{1}{T}\int_0^T \sum_k \sum_m \mathcal{H}^k(\boldsymbol{r})\, \phi^m(\boldsymbol{r})\, e^{i(k+m)\Omega t}\, e^{-in\Omega t} dt$$

$$\frac{1}{T}\sum_{m'}\phi^{m'}(\boldsymbol{r})\left(-m'\hbar\Omega+\varepsilon\right)\int_0^T e^{\mathrm{i}m'\Omega t}\,e^{-\mathrm{i}n\Omega t}dt =$$
$$= \frac{1}{T}\sum_k\sum_m \mathcal{H}^k(\boldsymbol{r})\,\phi^m(\boldsymbol{r})\int_0^T e^{\mathrm{i}(k+m)\Omega t}\,e^{-\mathrm{i}n\Omega t}dt$$

$$\frac{1}{T}\sum_{m'}\phi^{m'}(\boldsymbol{r})\left(-m'\hbar\Omega+\varepsilon\right)\frac{2\pi}{\Omega}\,\delta(m'-n) =$$
$$= \frac{1}{T}\sum_k\sum_m \mathcal{H}^k(\boldsymbol{r})\,\phi^m(\boldsymbol{r})\,\frac{2\pi}{\Omega}\,\delta(k+m-n)$$

$$\sum_{m'}\phi^{m'}(\boldsymbol{r})\left(-m'\hbar\Omega+\varepsilon\right)\delta(m'-n) = \sum_k\sum_m \mathcal{H}^k(\boldsymbol{r})\,\phi^m(\boldsymbol{r})\,\delta(k+m-n)$$
$$\phi^n(\boldsymbol{r})\left(-n\hbar\Omega+\varepsilon\right) = \sum_m \mathcal{H}^{n-m}(\boldsymbol{r})\,\phi^m(\boldsymbol{r})$$
$$\varepsilon\,\phi^n(\boldsymbol{r}) = \sum_m \mathcal{H}^{n-m}(\boldsymbol{r})\,\phi^m(\boldsymbol{r}) + n\hbar\Omega\,\phi^n(\boldsymbol{r})$$

donde $\delta(x)$ corresponde a la función delta de Kronecker. Esta ecuación se traduce finalmente en:

$$\sum_m\left[\mathcal{H}^{n-m}(\boldsymbol{r}) + n\hbar\Omega\,\delta(n-m)\right]\phi^m(\boldsymbol{r}) = \varepsilon\,\phi^n(\boldsymbol{r}) \tag{3.7}$$

De esta manera, el problema inicial dependiente del tiempo se transforma en uno de autovalores para el Hamiltoniano de Floquet independiente del tiempo, pero infinito. Para facilitar la interpretación podemos representar esta ecuación matricialmente. Considerando que $\{|i,n\rangle \equiv |i\rangle\otimes|n\rangle\}$ es una base apropiada para el espacio de Floquet (donde $\{|i\rangle\}$ y $\{|n\rangle\}$ son bases de los espacios $\mathscr{R}$ y $\mathscr{T}$, respectivamente), los elementos de la matriz pueden obtenerse entonces a partir de [206]:

$$\langle i,m|\,\mathcal{H}_F\,|j,n\rangle = \frac{1}{T}\int_0^T \langle i|\,\mathcal{H}_F\,|j\rangle\,e^{-\mathrm{i}(n-m)\Omega t}dt + n\hbar\Omega\delta(n-m)\delta_{ij} \tag{3.8}$$

El Hamiltoniano de Floquet en su forma matricial por bloques se esquematiza en la figura 3.3. Cada uno de los bloques está determinado por el término que se encuentra entre corchetes de la ecuación 3.7. Puede notarse que el Hamiltoniano tiene una estructura periódica infinita en la cual sólo cambia el número de $\hbar\Omega$ en los bloques diagonales. Por otra parte aquellos bloques que conectan diferentes estados (con $n \neq m$) están dados por las componentes de Fourier del potencial dependiente del tiempo.

La periodicidad en la estructura de $\mathcal{H}_F$ se ve reflejada en los autovalores (ε) y autovectores ($\phi(\boldsymbol{r})$). Esto implica que si ε es una cuasienergía del sistema, entonces $\varepsilon + n\hbar\Omega$ con $n \in \mathbb{Z}$ también lo es, tal como se obtuvo en la ecuación 3.5. Si la perturbación dependiente del tiempo es radiación electromagnética, el índice n puede ser interpretado como el número de excitaciones "fotónicas" en el sistema donde $n > 0$ ($n < 0$) implica que el mismo absorbió (emitió) n fotones [205]. A partir

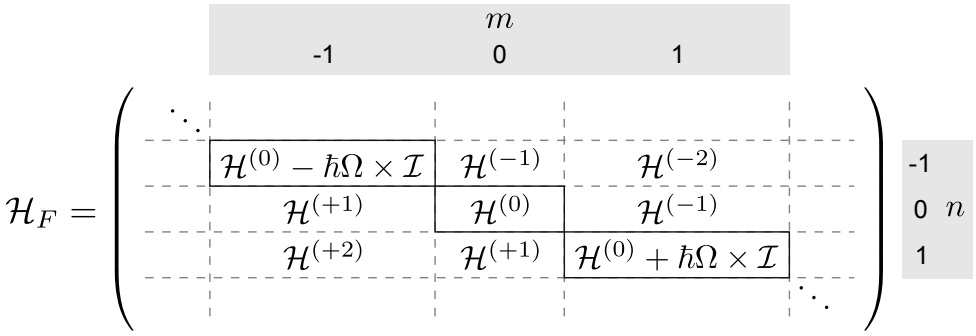


Figura 3.3: Hamiltoniano de Floquet en su representación matricial por bloques. Los mismos corresponden a las componentes de Fourier n, m del Hamiltoniano dependiende del tiempo. *Figura adaptada de [6].*

de este índice se puede definir un subespacio de $\mathscr{T}$ denominado n-ésima réplica de Floquet. De manera esquemática y similar a lo observado en la estructura de bandas (figura 3.2), estas réplicas corresponden a copiar el sistema original infinitas veces y desplazarlas en múltiplos enteros de $\hbar\Omega$ en energía (figura 3.4).

En conclusión, el problema original de un sistema dependiente del tiempo se mapea a través de la teoría de Floquet a uno independiente del tiempo pero en un espacio de mayor dimensión. Específicamente, podemos pensar este último como el sistema inicial replicado infinitas veces donde las interacciones entre las distintas réplicas están dadas por las componentes de Fourier de la perturbación periódica en el tiempo, tal como se desprende de la ecuación 3.7. Es interesante notar que para la solución planteada, en el dominio de las energías, no fue necesario recurrir al uso del operador de evolución temporal.

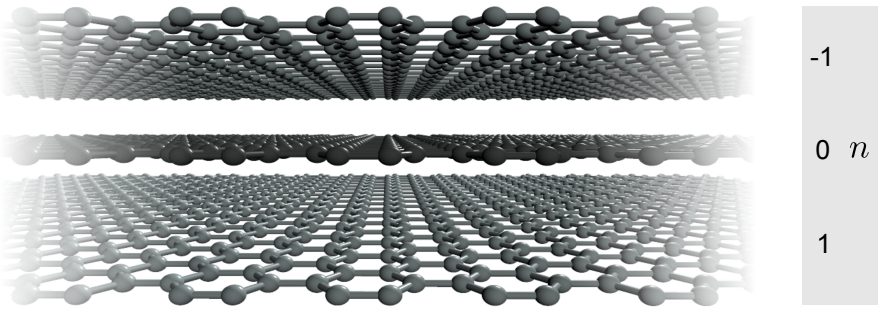


Figura 3.4: Representación esquemática de las réplicas de Floquet con $n = -1$, $n = 0$ y $n = 1$ de una muestra de grafeno bajo la acción de una perturbación externa dependiente del tiempo. *Figura adaptada de [6].*

3.2. Modelo atomístico

En el presente capítulo estudiamos cómo se ven afectadas las fases trivial y topológica del modelo SSH en presencia de una perturbación dependiente del tiempo

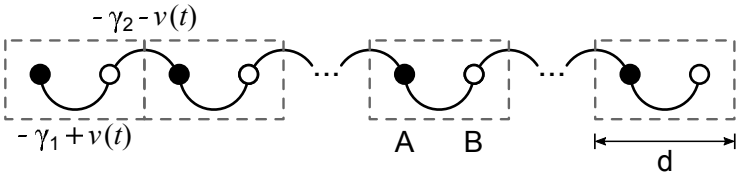


Figura 3.5: Esquema del modelo de Su-Schrieffer-Heeger en presencia de una perturbación dependiente del tiempo (detallada en el texto), con los sitios de tipo A marcados en negro y B en blanco. Se considera una sección finita del modelo formada por N celdas unidad de ancho d.

y periódica. Para ello empleamos un modelo atomístico (figura 3.5) que consiste en una variante del modelo SSH estático (sección 1.2.6) donde los hoppings están modulados en el tiempo de manera tal que dos enlaces consecutivos presentan fases opuestas. El Hamiltoniano tipo tight-binding que describe este sistema es:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}(t) \;=\; & \sum_{\alpha,j} E_{\alpha,j}\; c^{\dagger}_{\alpha,j} c_{\alpha,j} - \sum_{j} \Big(\gamma_1\; c^{\dagger}_{A,j} c_{B,j} + \;\gamma_2\; c^{\dagger}_{B,j-1} c_{A,j} + \text{c.h.}\Big) \;+ \\ & + \sum_{j} \Big(v(t)\; c^{\dagger}_{A,j} c_{B,j} - \;v(t)\; c^{\dagger}_{B,j-1} c_{A,j} + \text{c.h.}\Big) \end{aligned} \tag{3.9}$$

El primer término del lado derecho de la ecuación 3.9 corresponde al modelo SSH independiente del tiempo. En el mismo, $c^{\dagger}_{\alpha,j}$ y $c_{\alpha,j}$ son los operadores de creación y aniquilación, respectivamente, en el sitio α (que puede ser de tipo A o B) de la j-ésima celda unidad. Las energías de sitio $E_{\alpha,j}$ se definen iguales a cero de manera tal que fijan una energía de referencia. Para que exista la dimerización en el poliacetileno, es necesario que $\gamma_1 = \gamma_0 + \delta$ y $\gamma_2 = \gamma_0 - \delta$ donde δ da cuenta de la fuerza de la misma y γ_0 se elige como la unidad de energía. La constante de red para la fase dimerizada es d (como se representa en la figura 3.5) y la abreviatura c.h. implica el conjugado hermítico de los sumandos anteriores.

En el segundo término del lado derecho de la igualdad 3.9 se incorpora la perturbación externa dependiente del tiempo. Específicamente, elegimos una modulación de los términos de hopping con fase opuesta para elementos contiguos, de manera tal que presenta la misma constante de red que el sistema estático dimerizado. La función dependiente del tiempo está dada por $v(t) = 2\; V_{\text{ac}} \cos(\Omega t)$, la cual es periódica en t, de amplitud V_{ac} y período $T = 2\pi/\Omega$.

El Hamiltoniano del modelo SSH forzado dependiente del tiempo (ecuación 3.9) puede escribirse en su representación matricial usando la base de los sitios A y B. Si consideramos un sistema finito con N sitios, la matriz Hamiltoniana correspondiente es cuadrada, tridiagonal y de dimensión N, donde los elementos de la diagonal están dados por las energías de los sitios que son nulas, por definición. Los elementos en la diagonal superior a la principal valen, de manera alternada, $-\gamma_1 + v(t)$ y $-\gamma_2 - v(t)$; mientras que los de la diagonal inferior a la principal están dados por el conjugado hermítico de la anterior. Cuando el sistema a estudiar es infinito (bulk), podemos emplear el teorema de Bloch para cristales periódicos en su versión discreta. En este

caso, el Hamiltoniano en su representación matricial es:

$$\mathcal{H}(t) = \begin{pmatrix} 0 & [-\gamma_1 + v(t)] + [-\gamma_2 - v(t)]^* \, e^{-\mathrm{i}kd} \\ [-\gamma_1 + v(t)]^* + [-\gamma_2 - v(t)] \, e^{\mathrm{i}kd} & 0 \end{pmatrix} \tag{3.10}$$

3.2.1. Teoría de Floquet aplicada al modelo atomístico

Debido a la periodicidad temporal de la perturbación planteada en el presente capítulo, es posible emplear la teoría de Floquet (sección 3.1) para el estudio de las propiedades espectrales y topológicas del sistema de poliacetileno forzado. Comenzamos entonces determinando las componentes de Fourier del Hamiltoniano dependiente del tiempo según:

$$\mathcal{H}^n = \frac{1}{T} \int_0^T \mathcal{H}(t) \, e^{-\mathrm{i}n\Omega t} \, dt \tag{3.11}$$

Visto que la perturbación elegida $v(t) = 2 \, V_{\mathrm{ac}} \cos(\Omega t)$ puede ser descompuesta en exponenciales de grado 1 según $v(t) = V_{\mathrm{ac}} \left[\exp(\mathrm{i}\Omega t) + \exp(-\mathrm{i}\Omega t)\right]$, únicamente $\mathcal{H}^0$, $\mathcal{H}^1$ y $\mathcal{H}^{-1}$ son no nulas y están dadas por:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^0 &= -\sum_j \left(\gamma_1 \, c^\dagger_{A,j} c_{B,j} + \gamma_2 \, c^\dagger_{B,j-1} c_{A,j} + \mathrm{c.h.} \right) \\ \mathcal{H}^1 &= \sum_j V_{\mathrm{ac}} \left(c^\dagger_{A,j} c_{B,j} - c^\dagger_{B,j-1} c_{A,j} + \mathrm{c.h.} \right) \\ \mathcal{H}^{-1} &= \sum_j V_{\mathrm{ac}} \left(c^\dagger_{A,j} c_{B,j} - c^\dagger_{B,j-1} c_{A,j} + \mathrm{c.h.} \right) \end{aligned} \tag{3.12}$$

Las componentes de Fourier del Hamiltoniano pueden plantearse también en su representación matricial. Para un sistema infinito, empleando el teorema de Bloch en las ecuaciones 3.12 (o equivalentemente partiendo de la ecuación 3.10 y calculando las componentes) obtenemos:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^0 &= \begin{pmatrix} 0 & -\gamma_1 - \gamma_2 \, e^{-\mathrm{i}kd} \\ -\gamma_1 - \gamma_2 \, e^{\mathrm{i}kd} & 0 \end{pmatrix} \\ \mathcal{H}^1 = \mathcal{H}^{-1} &= \begin{pmatrix} 0 & V_{\mathrm{ac}} \left[1 - e^{-\mathrm{i}kd}\right] \\ V_{\mathrm{ac}} \left[1 - e^{\mathrm{i}kd}\right] & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{3.13}$$

El Hamiltoniano de Floquet (figura 3.3) resultante para el modelo SSH forzado infinito es una matriz tridiagonal por bloques, donde cada uno de ellos tiene dimensión 2 y los elementos de la diagonal son iguales a $n\hbar\Omega$, $n \in \mathbb{Z}$. Un razonamiento

equivalente puede realizarse para un sistema finito con N sitios, en cuyo caso los bloques del Hamiltoniano de Floquet serán matrices $N \times N$ tridiagonales y con la diagonal principal igual a múltiplos enteros de $\hbar\Omega$.

El modelo SSH tipo tight-binding corresponde a una cadena de sitios unidimensional que se extiende en la dirección x. Al incorporar la perturbación dependiente del tiempo a través de la teoría de Floquet, podemos interpretar el Hamiltoniano resultante como el equivalente al de un sistema bidimensional formado por infinitas réplicas del modelo SSH en la dirección y (figura 3.6), donde las energías de sitio de cada una de estas copias son múltiplos enteros de $\hbar\Omega$. Además, dos réplicas vecinas están acopladas mediante términos de hopping análogos a los del modelo SSH estático pero cuya magnitud está dada por V_{ac}.

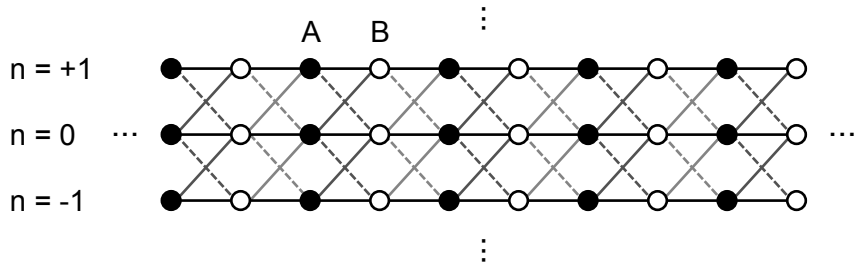


Figura 3.6: Representación esquemática de las réplicas de Floquet con $n = -1$, $n = 0$ y $n = 1$ del modelo SSH bajo la acción de una perturbación dependiente del tiempo en los hoppings.

3.2.2. Parámetros empleados en las simulaciones computacionales

El espacio de Fourier de las funciones periódicas en el tiempo con período T ($\mathscr{T}$), y por ende el espacio de Floquet, es infinito. Por lo tanto, para estudiar las propiedades del sistema en cuestión a partir de simulaciones computacionales, es necesario considerar y seleccionar un subespacio apropiado del mismo. Esto equivale a truncar el sistema bidimensional de la figura 3.6 en el eje y. El número de réplicas de Floquet empleadas determina el orden de detalle observado por ejemplo en las relaciones de dispersión. Es por esto que, para cada frecuencia de perturbación dependiente del tiempo, elegimos el subespacio de $\mathscr{T}$ adecuado según la energía de interés a la cual se realiza el cáclulo.

Los resultados presentados en el resto del capítulo se obtuvieron a partir de simulaciones computacionales donde se emplearon hasta 13 réplicas de Floquet ($-6 \leqslant n \leqslant 6$). Además, se trabajó con $\delta = \pm\, 0{,}3\ \gamma_0$, $V_{\mathrm{ac}} = 0{,}1\gamma_0$, y un rango para la frecuencia de la modulación temporal de los hoppings desde $0{,}8\gamma_0/\hbar$ hasta $4{,}4\gamma_0/\hbar$.

3.3. Estructura electrónica

En la introducción de esta tesis (sección 1.2.6) mostramos que la dimerización espacial del poliacetileno trae aparejada la apertura de un gap en la estructura de bandas y la consiguiente generación de dos fases topológicas diferentes. Pero, ¿qué

sucede si, en lugar de en el espacio real, la dimerización tiene origen temporal? ¿Se abrirán nuevos gaps en la estrucura de bandas? ¿Cómo se modificará la topología del sistema?

Comencemos estudiando la estructura de bandas del modelo SSH cuando la amplitud de la modulación dependiente del tiempo de los hoppings es nula ($V_{\mathrm{ac}} = 0$), lo que equivale a analizar el caso estático empleando la teoría de Floquet. En la figura 3.7 se muestra el espectro de las cuasienergías para el modelo SSH bulk cuando el sistema se encuentra dimerizado ($\delta \neq 0$, (b)) o no ($\delta = 0$, (a)) espacialmente. La escala de color empleada representa el peso de las distintas bandas en la réplica de Floquet $n = 0$, siendo azul el correspondiente al máximo valor posible (unitario) y gris a peso nulo. Esta elección se debe a que el peso sobre dicha réplica puede interpretarse como la contribución de cada estado de energía ε a la densidad de estados promediada en el tiempo a la misma energía [116].

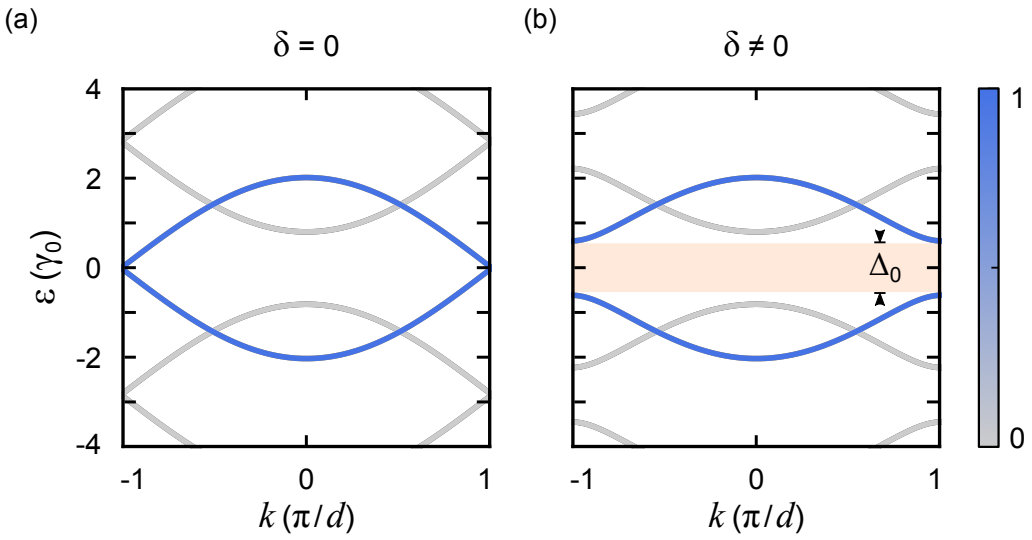


Figura 3.7: Espectro de cuasienergías para el modelo SSH bulk estático ($V_{\mathrm{ac}} = 0$) con (a) $\delta = 0$, y (b) $\delta = 0{,}3\gamma_0$. En el rango presentado se distinguen las réplicas de Floquet con $n = -1$, $n = 0$ y $n = 1$. La escala de color indica el peso de cada estado sobre la réplica $n = 0$ (blanco da cuenta de la ausencia de estados). Centrándose en esta réplica, se observa en (b) la apertura del gap estático de ancho Δ_0 a energía $\varepsilon = 0$.

En las estructuras de bandas presentadas en la figura 3.7 se pueden observar las distintas réplicas de Floquet. Ahora bien, si observamos únicamente aquellas donde la densidad de estados promediada en el tiempo es no nula, la relación de dispersión es idéntica a la del modelo SSH estático calculada por fuera del formalismo de Floquet tal como es de esperar (sección 1.2.6). Es interesante resaltar que, así como el modelo SSH estático presenta simetría quiral y electrón-hueco (debido a que las energías de los sitios A y B son iguales) y un espectro simétrico respecto de $\varepsilon = 0$, el mismo resultado se obtiene para el caso donde se considera una perturbación dependiente del tiempo (figura 3.7). Específicamente, podemos observar que si $+\varepsilon$

es un autovalor entonces su opuesto $-\varepsilon$ también lo es. Esto se debe a que el término de la modulación conserva la simetría de reversión temporal y satisface también una simetría quiral generalizada, donde el Hamiltoniano de Floquet anticonmuta con el operador $I_n \otimes \sigma_z$, con n el número de réplicas de Floquet consideradas. De manera general, si consideramos el Hamiltoniano de Floquet en su expresión infinita, el espectro es simétrico respecto de $\varepsilon = m\hbar\Omega/2$ (m entero).

Por otra parte, comparando las relaciones de dispersión (a) y (b) de la figura 3.7, podemos notar que se diferencian en la existencia de una zona de energía en la cual no hay estados electrónicos. Particularmente, si $\delta = 0$ el sistema presenta un comportamiento metálico; mientras que, cuando el término de dimerización es no nulo (figura 3.7 (b)), se observa la apertura de un gap a energía $\varepsilon = 0$ (y los respectivos múltiplos de $\hbar\Omega$) de magnitud $\Delta_0 = 4|\delta|$. La aparición de este gap se debe a la transición de Peierls o dimerización en el espacio real [150, 151], y ocurre en puntos de degeneración de la estructura de bandas (precisamente en $k = \pm\pi/d$).

Ahora bien, en la figura 3.7 podemos observar la presencia de otros puntos donde dos bandas se cruzan. En estos casos, cada una de ellas pertenece a una réplica de Floquet diferente. Debido a que la fuerza de la modulación temporal (V_{ac}) es igual a cero, las componentes de Fourier de orden 1 y -1 del Hamiltoniano de Floquet son también nulas. Por lo tanto, si bien existen puntos donde la estructura de bandas está degenerada, no hay un acoplamiento neto entre las diferentes réplicas que genere la apertura de un gap.

En el resto de la presente sección calculamos las propiedades espectrales del modelo SSH con una perturbación dependiente del tiempo. Para ello se realizaron simulaciones computacionales a partir del paquete Kwant para Python [167], en el cual se incorpora el Hamiltoniano de Floquet tight-binding para el sistema bulk en su representación como un sistema bidimensional (figura 3.6).

3.3.1. Modelo SSH forzado

Los efectos más interesantes de la perturbación dependiente del tiempo se observarán en los puntos donde el espectro de cuasienergías del modelo SSH forzado es degenerado. Debido a la simetría electrón-hueco del sistema, éstos están localizados a energías $\varepsilon = m\hbar\Omega/2$, con m un número entero. Por simplicidad, nos concentraremos en el rango de energías correspondiente a la réplica de Floquet con $n = 0$ ($-2 \leqslant \varepsilon \leqslant 2$). El análisis realizado puede ser posteriormente extendido a todo el espectro considerando la relación de equivalencia entre las distintas réplicas de Floquet.

En la figura 3.8 se presenta la estructura electrónica del modelo SSH cuando el sistema presenta una modulación temporal en los hoppings de magnitud $V_{\mathrm{ac}} = 0{,}1\gamma_0$ y frecuencia $\Omega = 2{,}8/\hbar$. En contraste con la figura 3.7, se evidencia la apertura de nuevos gaps en la estructura de bandas en los puntos donde dos réplicas de Floquet se cruzan. En particular, podemos notar que se levantan las degeneraciones a $\varepsilon = \pm\hbar\Omega/2$ que involucran estados de Floquet con $n = 0$ y $n = \pm 1$. Gaps similares

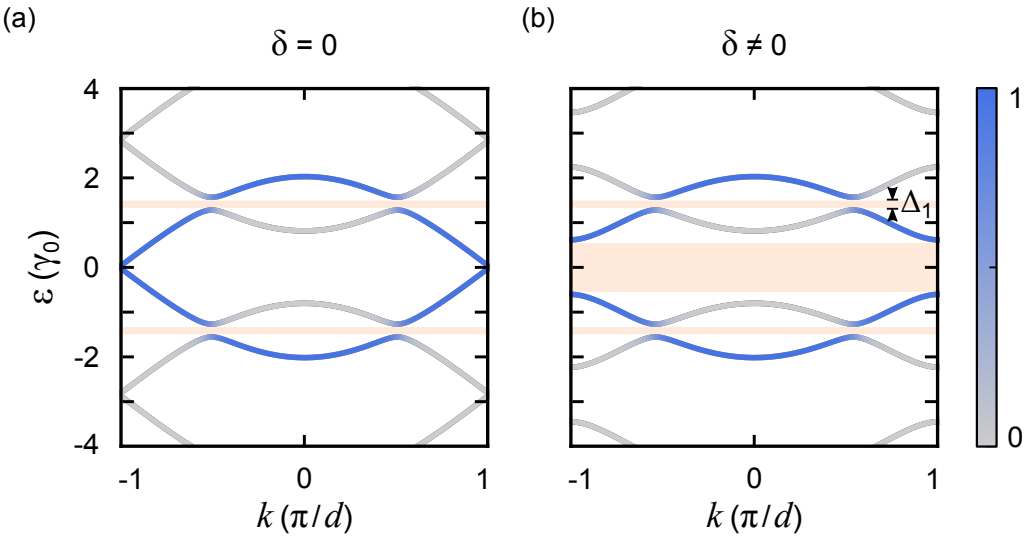


Figura 3.8: Espectro de cuasienergías para el modelo SSH bulk forzado ($\hbar\Omega = 2{,}8\gamma_0$ y $V_{\mathrm{ac}} \neq 0$) con (a) $\delta = 0$, y (b) $\delta = 0{,}3\gamma_0$. En el rango presentado se distinguen las réplicas de Floquet con $n = -1$, $n = 0$ y $n = 1$. La escala de color indica el peso de cada estado sobre la réplica $n = 0$ (blanco da cuenta de la ausencia de estados). Centrándose en esta réplica, y en comparación con la figura 3.7, se observa la apertura de gaps dinámicos de ancho Δ_1 a energía $\varepsilon = \pm\hbar\Omega/2$.

fueron observados previamente en nanotubos de carbono (sistemas que pueden ser considerados unidimensionales) interactuando con un único modo fonónico óptico [207, 208], que equivale a una versión cuantizada del modelo aquí considerado.

La apertura del gap por la acción de la perturbación dependiente del tiempo en el modelo SSH se origina en la periodicidad espacial de la misma. Al igual que cuando $\delta \neq 0$, la modulación temporal en los hoppings con fase opuesta entre acoplamientos vecinos genera una dimerización en el sistema; es decir, existe una componente con idéntico período espacial d. En el espacio de Floquet, esta perturbación mezcla diferentes réplicas ($\mathcal{H}^1$ y $\mathcal{H}^{-1}$ son no nulas) lo que conlleva el levantamiento de las degeneraciones entre estados electrónicos a $\pm\hbar\Omega/2$ (figura 3.8) y la generación de un gap de magnitud $\Delta_1 \simeq 4|V_{\mathrm{ac}}|$. Es interesante destacar también que en este caso no es necesario recurrir a la ruptura de la simetría de reversión temporal, al contrario de lo que ocurre por ejemplo en la inducción de gaps a partir de radiación laser en grafeno (como detallaremos en el capítulo 4) [116, 140].

Si se disminuye la frecuencia de la perturbación dependiente del tiempo, nuevas réplicas de Floquet ingresan en el rango de energías expandido por la correspondiente a $n = 0$ ($-2 \leqslant \varepsilon \leqslant 2$). Se originan entonces nuevos puntos de degeneración entre réplicas cuyos valores de n difieren en 2 o más, lo que trae aparejado el desarrollo de efectos de orden. En la figura 3.9 se presenta la estructura de bandas del modelo SSH forzado con $\Omega = 1{,}3\,\gamma_0/\hbar$. A simple vista, resulta evidente el mayor número de solapamientos entre réplicas en comparación con la figura 3.8.

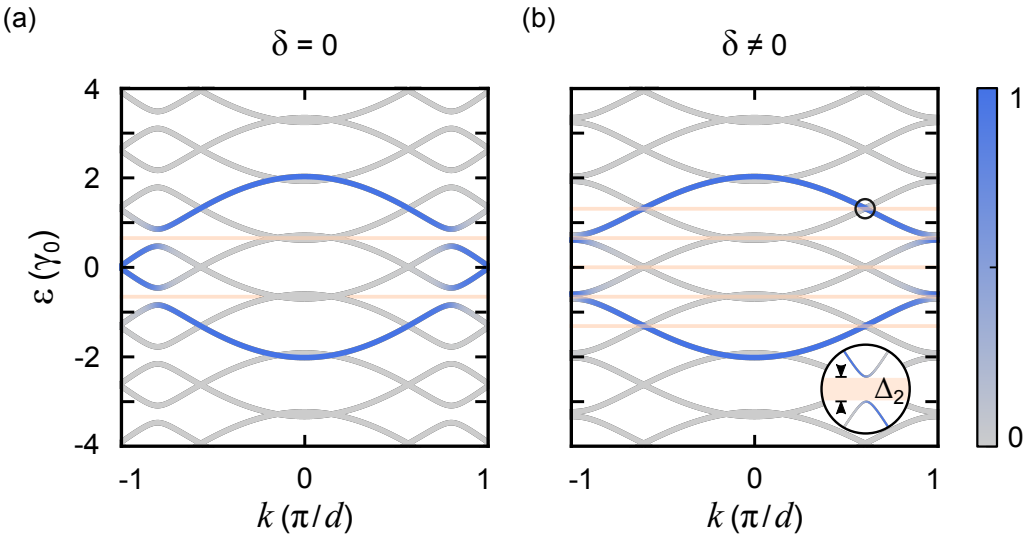


Figura 3.9: Espectro de cuasienergías para el modelo SSH bulk forzado ($\hbar\Omega = 1{,}3\gamma_0$ y $V_{\mathrm{ac}} \neq 0$) con (a) $\delta = 0$, y (b) $\delta = 0{,}3\gamma_0$. En el rango presentado se distinguen las réplicas de Floquet con n desde -3 a $+3$. La escala de color indica el peso de cada estado sobre la réplica $n = 0$ (blanco da cuenta de la ausencia de estados). Centrándose en esta réplica, y en comparación con la figura 3.8, se observa la apertura de nuevos gaps dinámicos de ancho Δ_2 a energía $\varepsilon = \pm\hbar\Omega$.

Analizando la figura 3.9 podemos notar que los gaps en $\varepsilon = \pm\hbar\Omega/2$ se tornan prácticamente imperceptibles. Además, nuevos gaps inducidos también por la modulación temporal se originan en $\varepsilon = \pm\hbar\Omega$ cuando $\delta \neq 0$ (no están presentes en la figura 3.9(a)). Estos últimos corresponden a la mezcla entre las réplicas de Floquet $n = 0$ y $n = \pm 2$, involucrando transiciones virtuales a través de estados intermedios. La magnitud del gap está dada por $\Delta_2 \simeq (\Delta_1/(2\hbar\Omega))^2\Delta_0$, o de manera más sencilla, es proporcional a $V_{\mathrm{ac}}^2 \cdot \Delta_0$. Este resultado muestra que la presencia de los nuevos gaps de ancho Δ_2 depende, entre otros factores, de la existencia del gap estático. Por otra parte, el gap en energía cero se ve reducido en comparación con el de la figura 3.8, debido a que existen estados electrónicos de las réplicas con $n = \pm 1$. El cruce de las mismas genera un nuevo gap equivalente al de $\varepsilon = \pm\hbar\Omega$ de ancho Δ_2.

El proceso de generación de gaps, por fuera de los observados en el modelo estático, involucra entonces la mezcla de réplicas de Floquet con distinto número n. Este resultado implica que el intercambio de energía en el sistema (emisión o absorción de “fotones”) es crucial para la apertura de los mismos, resaltando así su naturaleza no-adiabática. Usando la teoría de Floquet probamos que la perturbación dependiente del tiempo puede inducir la creación de nuevos gaps en la estructura electrónica.

3.3.2. Regímenes de alta y baja frecuencia

La estructura electrónica del modelo SSH forzado depende fuertemente de la frecuencia de la perturbación temporal. En el caso donde $\Omega \gg \gamma_0/\hbar$, las diferentes

réplicas de Floquet no se superponen entre sí. Por lo tanto, en la relación de dispersión observamos los gaps a $\varepsilon = m\hbar\Omega$ ($m \in \mathbb{Z}$) correspondientes al modelo estático y a aquellos que se generan entre una réplica y la siguiente. Es decir que, al analizar el comportamiento del sistema a una dada energía de interés, sólo estudiamos efectos generados en una única réplica de Floquet. De esta forma podemos definir un régimen de alta frecuencia, el cual varía según la energía que se considere. Por ejemplo, si estamos interesados en lo que sucede cerca de $\varepsilon = 0$, el sistema se encuentra en dicho régimen siempre que $\hbar\Omega > 2|\gamma_0|$ (como se puede observar en la figura 3.8). Por otra parte, cerca de $\varepsilon = \pm\hbar\Omega/2$, el régimen de alta frecuencia tiene lugar para $\hbar\Omega > 4|\gamma_0|$ donde los subespacios de Floquet con $n = 0$ y $n = \pm 1$ no se superponen y los gaps en $\pm\hbar\Omega/2$ son producto de la separación de las réplicas (y no de la mezcla de las mismas).

Al disminuir la frecuencia de la modulación dependiente del tiempo, nuevas réplicas de Floquet se solapan entre sí. Esto implica que dos o más de ellas presentan estados próximos a la energía de interés. En esa situación se ingresa al régimen de trabajo de baja frecuencia. La estructura electrónica presentada en la figura 3.9, por ejemplo, corresponde a este régimen. Alrededor de $\varepsilon = 0$, tanto la réplica de Floquet con $n = 0$ como aquellas con $n = \pm 1$ están presentes y el gap del modelo estático de magnitud Δ_0 se ve acotado por el nuevo gap de magnitud Δ_2. Equivalentemente, si estudiamos el comportamiento alrededor de $\varepsilon = \pm\hbar\Omega/2$, podemos observar la apertura de gaps debido a la mezcla de las réplicas con $n = 0$ y $n = \pm 1$ en valores de k próximos a $\pm\pi/d$ y a la mezcla de las réplicas con $n = \mp 1$ y $n = \pm 2$ para $k \simeq 0$, evidenciando así que la figura 3.9 se encuadra en el régimen de trabajo de baja frecuencia.

3.3.3. Diagrama de frecuencias

Empleando la teoría de Floquet mostramos que la perturbación dependiente del tiempo puede inducir la creación de nuevos gaps o la modificación de aquellos preexistentes. Estas variaciones dependen críticamente de la frecuencia (Ω) y la fuerza (V_{ac}) de la modulación. Para analizar en mayor detalle el primer caso, graficamos en la figura 3.10 la estructura electrónica del modelo SSH forzado en función de la frecuencia de la perturbación temporal.

La figura 3.10 muestra cómo los gaps en $\varepsilon = 0$ y $\varepsilon = \pm\hbar\Omega/2$ (y sus respectivos múltiplos) varían con la frecuencia de la modulación temporal. En la misma, para cada valor de frecuencia, el espectro de Floquet se comprime en un único valor en el eje de las abscisas. Además se utiliza una escala de color idéntica a la de las figuras 3.7, 3.8 y 3.9, resaltando el peso de los estados en el subespacio de Floquet con $n = 0$. Esta coloración es equivalente al valor de la densidad de estados promediada en el tiempo a una dada energía. Si analizamos el gráfico de derecha a izquierda, vemos como se pasa de un régimen de alta frecuencia (donde las réplicas de Floquet no se solapan) a uno de baja frecuencia.

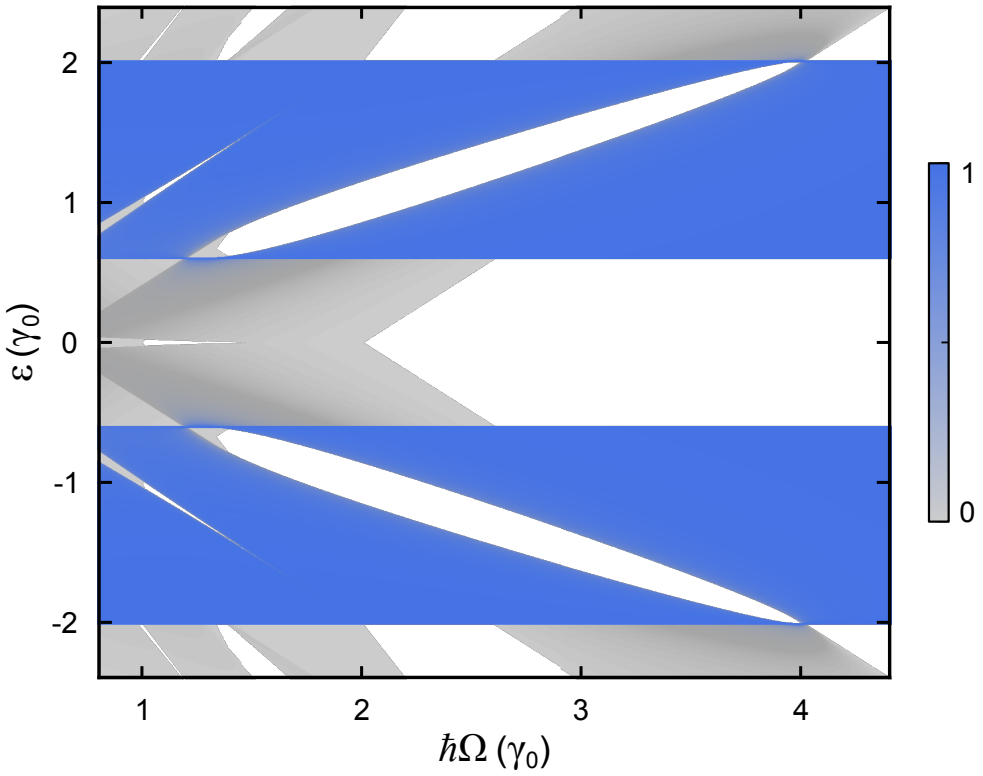


Figura 3.10: Espectro de cuasienergías para el modelo SSH bulk forzado ($V_{\mathrm{ac}} \neq 0$) en función de la frecuencia de la perturbación dependiente del tiempo. La escala de color indica el peso de cada estado sobre la réplica $n = 0$ (blanco da cuenta de la ausencia de estados).

Por otra parte, sabemos que debido a la simetría del espectro global de Floquet, todas las nuevas réplicas que entran en juego a la energía de interés lo hacen de a pares. Esto genera la apertura de nuevos gaps de mayor orden y menor magnitud. Por ejemplo en la figura 3.9, el gap de la réplica con $n = 0$ a $\varepsilon = 0$ se iguala con el gap más débil a $\hbar\Omega$ por encima (debajo) del centro de la réplica $n = -1$ ($n = 1$), de magnitud Δ_2. Para que el espectro total de Floquet presente un gap es necesario entonces que todas las réplicas exhiban simultáneamente uno a la energía de interés. De esta manera, el gap resultante está acotado por aquel de menor magnitud. Los valores de $\hbar\Omega$ donde las distintas réplicas de Floquet comienzan o dejan de tener peso a una dada energía, definen potenciales puntos de transición donde la topología de la estructura de bandas puede llegar a modificarse.

Puntos de transición

A partir de la estructura de bandas del modelo SSH estático podemos determinar las frecuencias de la perturbación dependiente del tiempo a las cuales un nuevo par de réplicas de Floquet tiene (o deja de tener) peso espectral a una energía de interés. Para ello planteamos cuáles son las bandas de las distintas réplicas que se solapan a una dada energía y determinamos las frecuencias a las cuales ocurren estos cruces.

La relación de dispersión para el poliacetileno dimerizado, de constante de red d y en ausencia de una perturbación externa, es $\varepsilon(k) = \pm\sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2 + 2\gamma_1\gamma_2\cos(k\cdot d)}$, con $\gamma_1 = \gamma_0+\delta$ y $\gamma_2 = \gamma_0-\delta$ (sección 1.2.6). Si colapsamos esta estructura en un único punto en el eje de las abscisas, las bandas de valencia y conducción se expanden en los rangos de energía $-2\gamma_0 < \varepsilon_{\mathrm{V}} < -2\delta$ y $2\delta < \varepsilon_{\mathrm{C}} < 2\gamma_0$, respectivamente.

Para determinar los puntos de transición en el diagrama de frecuencias del modelo SSH forzado, supongamos que se apaga la perturbación externa ($V_{\mathrm{ac}} = 0$) pero se mantiene el esquema de réplicas de Floquet (de manera equivalente a la figura 3.7). Sabemos que estas últimas difieren entre sí en un múltiplo entero de $\hbar\Omega$ (ecuación 3.5). Por lo tanto, cada réplica de Floquet tiene peso espectral en los rangos de energía $-2\gamma_0 + n\hbar\Omega < \varepsilon_{\mathrm{V}}^n < -2\delta + n\hbar\Omega$ y $2\delta + n\hbar\Omega < \varepsilon_{\mathrm{C}}^n < 2\gamma_0 + n\hbar\Omega$.

Comencemos analizando los cruces entre réplicas de Floquet a $\varepsilon = 0$. Debido a la simetría electrón-hueco del Hamiltoniano del modelo SSH forzado, el espectro de Floquet es simétrico y por ende cada vez que un par de bandas adquiere peso espectral lo hace de a pares. Si comenzamos en el régimen de alta frecuencia y vamos disminuyendo la misma, el primer punto de transición ocurre cuando la banda de valencia de la réplica con $n = 1$ se solapa con la banda de conducción de la $n = -1$. Al seguir disminuyendo se pueden dar dos situaciones: que las réplicas de Floquet con $n = \pm2, \pm3, ...$ comiencen a tener estados a la energía de interés, o bien que entren a la zona del gap estático de dichas réplicas y dejen de tenerlos. Los puntos de transición correspondientes al primer caso quedan definidos por:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathrm{C,max}}^{-m} &= \varepsilon_{\mathrm{V,min}}^{m} \\ 2\gamma_0 + (-m)\hbar\Omega &= -2\gamma_0 + m\hbar\Omega \\ \hbar\Omega &= \frac{2\gamma_0}{m} \end{aligned} \tag{3.14}$$

con $m \in \mathbb{N}$. Por la otra parte, las distintas réplicas dejan de tener peso espectral a $\varepsilon = 0$ en los puntos de transición dados por:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathrm{C,min}}^{-m} &= \varepsilon_{\mathrm{V,max}}^{m} \\ 2\delta + (-m)\hbar\Omega &= -2\delta + m\hbar\Omega \\ \hbar\Omega &= \frac{2\delta}{m} \end{aligned} \tag{3.15}$$

Un razonamiento análogo se puede realizar para los gaps en $\varepsilon = \pm\hbar\Omega/2$. En particular, nos centramos en aquel a energía positiva ya que, debido a la simetría del espectro, los puntos de transición son idénticos para ambos. En este caso, las primeras réplicas que se cruzan son aquellas con $n = 0$ y $n = 1$. Al disminuir aún más la frecuencia puede que las réplicas con $n = -1$ y $n = 2$ (y así sucesivamente) comiencen a solaparse entre sí a la energía de interés, definiendo los siguientes

puntos de transición:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathrm{C,max}}^{-m+1} &= \varepsilon_{\mathrm{V,min}}^{m} \\ 2\gamma_0 + (-m+1)\hbar\Omega &= -2\gamma_0 + m\hbar\Omega \\ \hbar\Omega &= \frac{2\gamma_0}{2m-1} \end{aligned} \tag{3.16}$$

con $m \in \mathbb{N}$. De manera semejante, la frecuencia a la cual las distintas réplicas dejan de tener estados electrónicos a la energía $\hbar\Omega/2$ está dada por:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathrm{C,min}}^{-m+1} &= \varepsilon_{\mathrm{V,max}}^{m} \\ 2\delta + (-m+1)\hbar\Omega &= -2\delta + m\hbar\Omega \\ \hbar\Omega &= \frac{2\delta}{2m-1} \end{aligned} \tag{3.17}$$

Las ecuaciones 3.14, 3.15, 3.16 y 3.17 definen entonces los valores de $\hbar\Omega$ correspondientes a puntos de transición en el diagrama de frecuencias (figura 3.10).

En la próxima sección analizamos en detalle la topología de la estructura electrónica del modelo SSH forzado y sus transiciones a las frecuencias calculadas de la perturbación temporal.

3.4. Topología

El análisis de la estructura electrónica del poliacetileno dimerizado con una modulación temporal da cuenta tanto de la apertura de nuevos gaps en el espectro de Floquet como de los cierres y posteriores reaperturas (transiciones) que ocurren en el gap nativo. Sin embargo, nos resta determinar aún su característica más interesante: su topología. Sabemos que el modelo SSH sin perturbar presenta dos fases topológicas diferentes (sección 1.2.6): una trivial (sin estados de borde), y otra topológica (con estados de borde) [146, 147]. Frente a la modulación temporal de los hoppings, nos interesa entonces indagar sobre la fase topológica de los gaps nativos ($\varepsilon = 0$) y de Floquet ($\varepsilon = \pm\hbar\Omega/2$), la presencia de estados de borde robustos y cómo estas propiedades dependen de la topología del modelo SSH sin perturbar.

En la presente sección estudiamos cómo la perturbación dependiente del tiempo afecta la topología nativa del sistema y qué ocurre en los nuevos gaps de Floquet que se generan. Este análisis se realiza en un amplio rango de frecuencias elegidas de manera tal que abarcan un intervalo relevante donde se pueden realizar experimentos con átomos fríos. Para ello comenzamos determinando, a partir de simulaciones computacionales que emplean el módulo Kwant para Python [167], la existencia y las características de los estados de borde de Floquet en un sistema finito del modelo SSH forzado. Diseñamos también un código propio utilizando funciones de Green para corroborar los resultados obtenidos mediante la comparación con el caso de un sistema semi-infinito (con un único borde). Este análisis se complementa con el

cálculo numérico del invariante topológico pertinente, la fase de Zak [107], utilizando el paquete Python Tight-Binding (PythTB) [170].

3.4.1. Estados de borde de Floquet

Un primer indicio de la topología de un sistema es la presencia (o ausencia) de estados de borde robustos en una muestra finita. Es por ello que empezamos estudiando el espectro de Floquet del modelo SSH forzado para muestras finita y semi-infinita (presenta un único borde y se extiende al infinito en la dirección opuesta), de manera análoga a lo realizado para el sistema bulk. La ventaja del modelo semi-infinito radica en que presenta tanto la estructura de bandas propia del bulk como los posibles estados de borde existentes en el sistema acotado.

Las figuras 3.11 (a) y (b) muestran los espectros de Floquet obtenidos para el sistema semi-infinito en función de la energía ($\hbar\Omega$) de la perturbación temporal (equivalente a la figura 3.10 para el sistema bulk). Los resultados presentados en la figura (a) corresponden al modelo SSH forzado con $|\gamma_1/\gamma_2| > 1$, mientras que los de la (b) a $|\gamma_1/\gamma_2| < 1$. La escala de color asociada corresponde al peso de los estados en el subespacio de Floquet con $n = 0$, lo cual es equivalente al valor de la densidad de estados promediada en el tiempo a una dada energía.

Comparando el espectro de Floquet obtenido para el sistema semi-infinito con aquel del bulk (figura 3.10), podemos determinar la existencia de estados en la mitad de los gaps. Los mismos están graficados en rojo en las figuras 3.11 (a) y (b), independientemente del peso en una réplica particular. De esta forma es posible observar fácilmente su presencia en todo el rango de frecuencias empleado. Específicamente estos estados se encuentran, cuando están presentes, a energías $\varepsilon = \pm m\hbar\Omega/2$ con $m \in \mathbb{Z}$. Resulta interesante a primera vista que, para valores impares de m, los estados son insensibles a la topología nativa del sistema sin perturbar. En cambio si m es par, los gaps aparecen sólo cuando $\delta \neq 0$ (figuras 3.8 (a) y (b)) y la presencia de estados de borde en los mismos depende de la topología del modelo SSH independiente del tiempo. Un resultado equivalente se obtiene para el caso de un sistema finito suficientemente grande, donde los estados aislados se encuentran muy próximos entre sí y por ende no se distinguen de las bandas del modelo infinito en el diagrama de frecuencias. Por otra parte, siguiendo el dibujo de los estados de borde con la frecuencia de la perturbación temporal, las figuras 3.11 (a) y (b) se parecen ampliamente a los diagramas tipo ventilador o abanico (“diagramas de fan”) utilizados en las gráficas de niveles de Landau como función del campo magnético.

En primer lugar, comprobamos que los estados que se encuentran a la mitad de un gap de energía corresponden efectivamente a estados de borde. En el caso del espectro de Floquet para el sistema semi-infinito vemos que en cada gap hay uno sólo de estos estados, mientras que para una muestra finita hay dos en total. Este resultado nos da un primer indicio de que los mismos son estados de borde de Floquet. Para corroborarlo determinamos la función de onda al cuadrado de los estados que se encuentran en la mitad del gap en una muestra finita. En particular,

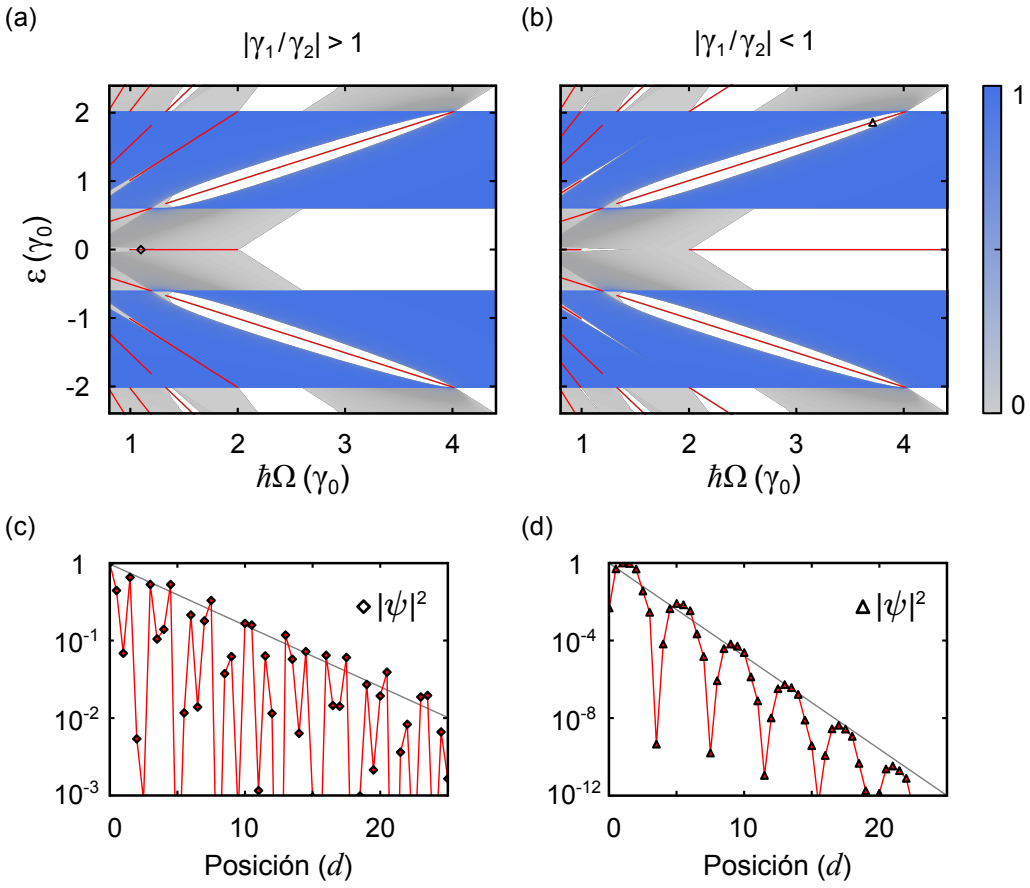


Figura 3.11: Espectro de cuasienergías para el modelo SSH semi-infinito forzado ($V_{\mathrm{ac}} \neq 0$) en función de la frecuencia de la perturbación dependiente del tiempo, para el sistema nativo (a) trivial ($\delta = 0{,}3\gamma_0$), y (b) topológico ($\delta = -0{,}3\gamma_0$). La escala de color indica el peso de cada estado sobre la réplica $n = 0$ (blanco da cuenta de la ausencia de estados). Los estados localizados a la mitad del gap de energía (y espacialmente en el borde del sistema) se muestran en rojo independientemente de su peso en una réplica de Floquet en particular. El módulo al cuadrado de la componente del autovector en función de la posición para dos de ellos, marcados con un diamante en (a) y triángulo en (b), se presenta en (c) y (d), respectivamente. El decaimiento exponencial de la función de onda se representa en línea gris.

en la figura 3.11 (c) y (d) presentamos las funciones de onda correspondientes a estados en el gap a energía $\varepsilon = 0$ (identificado con un diamante en la figura 3.11(a)) y a $\varepsilon = \hbar\Omega/2$ (triángulo en la figura 3.11 (b)). El primer caso corresponde al módulo al cuadrado de la función de onda localizada en la réplica de Floquet con $n = 1$ (que es idéntica a la con $n = -1$); mientras que en el segundo se consideró el subespacio con $n = 0$ (el mismo resultado se obtiene con $n = 1$). En las figuras podemos observar el decaimiento exponencial de la función de onda hacia el centro de la muestra, donde la constante de decaimiento está determinada por la mitad del ancho del gap correspondiente (esta caída está graficada en gris para su comparación). Además se visualizan ondulaciones en la función de onda generadas por un efecto de interferencia, debido a la existencia de dos subredes en el modelo y a la presencia de la perturbación dependiente del tiempo.

Sabemos que la topología del modelo SSH sin perturbar queda determinada por la relación $|\gamma_1/\gamma_2|$ (sección 1.2.6), siendo trivial cuando $|\gamma_1/\gamma_2| > 1$ y no trivial (o topológica) cuando $|\gamma_1/\gamma_2| < 1$. Por otra parte, en la sección anterior concluimos que en el régimen de alta frecuencia el sistema modulado temporalmente se comporta exactamente igual al no perturbado. Este resultado se corrobora una vez más a partir de las figuras 3.11 (a) y (b) en las cuales observamos que el sistema forzado a energía $\varepsilon = 0$ y en el régimen de alta frecuencia ($\hbar\Omega > 2\gamma_0$) presenta una respuesta idéntica al modelo nativo: la figura (a) no presenta estados de borde de Floquet mientras que la (b) sí.

A medida que disminuimos la frecuencia de la modulación temporal, y pasamos del régimen de alta a baja frecuencia, atravesamos distintos puntos de transición. Particularmente, para energía $\varepsilon = 0$, vemos que en $\hbar\Omega = 2|\gamma_0|$ las réplicas con $n = \pm 1$ comienzan a tener peso espectral de manera tal que el gap nativo se cierra. Sin embargo, si se reduce levemente la frecuencia, $\hbar\Omega \to 2|\gamma_0|^-$, un nuevo gap de ancho Δ_2 se abre. Examinando los estados de borde de Floquet presentes (o ausentes) a $\varepsilon = 0$ en las figuras 3.11 (a) y (b), resulta evidente la variación que ocurre al traspasar dicho punto de transición. Específicamente, la fase topológica trivial del modelo SSH ($|\gamma_1/\gamma_2| > 1$, figura 3.11 (a)) se vuelve no trivial, es decir, la modulación dependiente del tiempo crea nuevos estados de borde localizados en la réplicas de Floquet con $n = \pm 1$. Por el contrario, para el sistema topológico independiente del tiempo (figura 3.11 (b)), la perturbación destruye los estados de borde nativos.

Siguiendo con el análisis para el gap a energía $\varepsilon = 0$, en $\hbar\Omega \leq |\gamma_0|$ las réplicas de Floquet con $n = \pm 2$ entran en juego. En este punto de transición, el gap se cierra nuevamente y se reabre un tercero, reduciendo así el ancho del mismo y modificando la presencia de estados a mitad del gap. Esto implica que los estados de borde de Floquet desaparecen para el modelo SSH nativo trivial ($|\gamma_1/\gamma_2| > 1$, figura 3.11(a)), mientras que reemergen si el sistema sin perturbar se encuentra en su fase topológica ($|\gamma_1/\gamma_2| < 1$, figura 3.11 (b)). En este último caso, y al igual que en el caso del poliacetileno dimerizado independiente del tiempo, sólo se observan dos estados de borde de Floquet en total. Sin embargo los nuevos estados de Floquet difieren en que su peso se encuentra predominantemente en las réplicas que determinan el ancho del gap, es decir, aquellas con $n = \pm 2$.

En el intervalo de frecuencias que se muestra en las figuras 3.11 (a) y (b), y en función de las ecuaciones determinadas en la sección anterior, no se encuentra un tercer punto de transición para $\varepsilon = 0$. Sin embargo a partir de los resultados presentados se puede revelar la existencia de una competencia entre la topología nativa del modelo SSH sin perturbar y los procesos inelásticos asistidos por “fotones” (es decir, aquellos que involucran réplicas de Floquet con $n \neq 0$).

Por otra parte, se puede realizar un análisis equivalente para el gap de Floquet en energía $\varepsilon = \hbar\Omega/2$ (debido la simetría quiral del sistema, el mismo resultado se obtiene para $\varepsilon = -\hbar\Omega/2$). En las figuras 3.11 (a) y (b) se evidencia la aparición de estados de

borde a la mitad de dicho gap de energía para el régimen de bajas frecuencias. A primera vista resulta notorio que la existencia de los mismos es independiente de la fase topológica nativa del sistema (ambas figuras son equivalentes en estos gaps).

El primer punto de transición a energía $\varepsilon = \hbar\Omega/2$, que implica el cambio del régimen de alta a baja frecuencia, se encuentra en $\hbar\Omega = 4\gamma_0$. Si la frecuencia de la perturbación es menor a esta, se abre un gap producto del cruce de las réplicas con $n = 0$ y $n = 1$, que aloja exactamente dos estados de borde de Floquet con peso espectral en ambas réplicas (figura 3.11(d)). Este comportamiento se preserva hasta que se atraviesa el próximo punto de transición en $\hbar\Omega = 4|\gamma_0|/3$ donde los estados desaparecen debido a que los subespacios de Floquet correspondientes a $n = -1$ y $n = 2$ entran en juego. Nuevamente el proceso es revertido en $\hbar\Omega = 4\delta = 1{,}2\gamma_0$ (siguiente punto de transición), frecuencia a la cual las réplicas de Floquet con $n = 0$ y $n = 1$ dejan de tener peso espectral en $\varepsilon = \hbar\Omega/2$. Disminuyendo aún más la frecuencia, no es posible encontrar un nuevo punto de transición en el intervalo que se muestra en las figuras 3.11 (a) y (b), y en el límite izquierdo de las figuras se observa la existencia de dos estados de borde a $\varepsilon = \pm\hbar\Omega/2$.

Los estados de borde de Floquet en el modelo SSH forzado y a bajas frecuencias no pueden ser explicados a partir del argumento simple empleado para el sistema sin perturbar (caso límite donde uno de los dos hoppings era nulo). El ancho de banda finito de la estructura electrónica es crucial para generar o destruir los estados en la mitad del gap, ya que estas variaciones ocurren por la interacción de la cadena lineal con la energía del “fotón” (permitiendo o restringiendo procesos inelásticos). Esta importancia se ve reflejada por ejemplo en los puntos de transición, que corresponden a frecuencias a las cuales comienzan (o dejan) de cruzarse las bandas electrónicas de dos réplicas diferentes y delimitan las posibles transiciones topológicas.

3.4.2. Fase de Zak

La aparición y destrucción de estados de borde en el espectro de cuasienergías de Floquet brinda una primera indicación de la topología del modelo SSH forzado. Este estudio se complementa y valida con el cálculo del invariante topológico respectivo. Previamente notamos que el poliacetileno dimerizado se comporta como un material unidimensional, siendo la fase de Zak el invariante que lo caracteriza (sección 1.2.6, [107]). De hecho, este invariante ha sido medido en experimentos con átomos fríos que simulan el modelo SSH nativo [153]. Por lo tanto, calculamos la fase de Zak acumulada para los gaps de interés en una muestra infinita del modelo SSH modulado temporalmente y comparamos con el resultado obtenido para los estados de borde de Floquet.

Cálculo para el modelo forzado

La fase de Zak para un sistema unidimensional está definida por [107]:

$$\mathcal{Z} = \mathrm{i} \oint \langle u_k \mid \partial_k u_k \rangle \tag{3.18}$$

donde $|u_k\rangle$ corresponden a los estados de Bloch periódicos espacialmente. En el modelo SSH sin perturbar los estados de Bloch pueden ser obtenidos analíticamente (sección 1.2.6), pero no así cuando se incorpora la modulación temporal. Esto se debe a que el Hamiltoniano de Floquet del sistema es infinito, y aun cuando es truncado a un número finito de réplicas, la complejidad del cálculo impide su resolución analítica. Es por esto que, en nuestro caso, realizamos el cálculo de la fase de Zak de manera númerica. En particular se empleó el desarrollo matemático realizado por Rafaelle Resta [171], el cual está incorporado en su versión discreta en el paquete Python Tight-Binding (PythTB) [170].

Es importante resaltar que, si bien para el cálculo de la estructura electrónica fue necesario truncar también el Hamiltoniano de Floquet para obtener las cuasienergías, es más comprometida aún la elección del número de réplicas a considerar en la resolución de la fase de Zak. Específicamente el subespacio de Floquet se debe elegir de manera tal que todas las transiciones relevantes a la energía de Floquet estén consideradas. Por ejemplo, si estamos analizando el gap estático a $\varepsilon = 0$ cuando la perturbación periódica en el tiempo es de energía $1{,}1\gamma_0$ (correspondiente al estado de la figura 3.11(c)), debemos obligatoriamente considerar las réplicas de Floquet con $n = -1$ y $n = 1$ que son las responsables de la apertura de dicho gap y todas las intermedias (en este caso, aquella con $n = 0$). En particular, para el cálculo del invariante topológico en los gaps estáticos y de Floquet en el intervalo de frecuencias de la perturbación temporal presentado en la figura 3.11 se emplearon hasta 13 réplicas de Floquet.

Por otra parte, el invariante topológico calculado corresponde a una fase cuyo valor está definido de manera única en el intervalo $(0, 2\pi)$. Debido al método de resolución numérico y a su carácter de fase, el invariante no establece por sí solo la topología del sistema. Además, un problema fundamental de la fase de Zak en una dimensión es que el valor exacto depende de la elección de la celda unidad [153]. Sin embargo, sabemos que las fases triviales y topológicas en sistemas unidimensionales difieren entre sí en unidades enteras de π. Específicamente, la suma de las fases de Zak para todas las bandas con energía por debajo de un dado gap indican el carácter topológico (la fase acumulada es π) o trivial (la fase acumulada es nula) de dicho gap. Por lo tanto, a partir del invariante obtenido analíticamente para el modelo SSH sin perturbar podemos asociar las propiedades topológicas del sistema forzado en el régimen de alta frecuencia con la fase de Zak calculada númericamente, y extenderla después para otras frecuencias.

Fase de Zak para el modelo SSH forzado

Calculemos en primer lugar la fase de Zak para el modelo SSH modulado temporalmente a una única frecuencia como por ejemplo $\hbar\Omega = 2{,}8\gamma_0$. En este caso, el gap a $\varepsilon = 0$ queda definido por la réplica de Floquet con $n = 0$, mientras que aquel a $\varepsilon = \hbar\Omega/2$ está delimitado por los subespacios $n = 0$ y $n = 1$. Por lo tanto, es obligatorio considerar al menos estas dos réplicas de Floquet, y por la simetría del espectro también incorporamos la correspondiente a $n = -1$.

Al truncar el Hamiltoniano de Floquet estamos haciendo una aproximación, y como tal, mientras mayor sea el subespacio de Floquet considerado, más preciso será el resultado. Sin embargo, el hecho de que estamos calculando un invariante topológico que es robusto nos permite acotar de manera radical quedándonos con sólo estas tres réplicas. De esta forma, podemos realizar el cálculo de la fase de Zak no sólo de manera numérica sino también analítica. En ambos casos, el valor de las fases $\mathcal{Z}_\alpha$ para cada una de las bandas marcadas con letras A-F en la estructura electrónica de la figura 3.12 es:

$$\mathcal{Z}_\alpha = \begin{cases} 0\,(\alpha = A, F) \\ \pi\,(\alpha = B, C, D, E) \end{cases} \qquad |\gamma_1/\gamma_2| > 1 \tag{3.19}$$

$$\mathcal{Z}_\alpha = \begin{cases} \pi\,(\alpha = A, F) \\ 0\,(\alpha = B, C, D, E) \end{cases} \qquad |\gamma_1/\gamma_2| < 1 \tag{3.20}$$

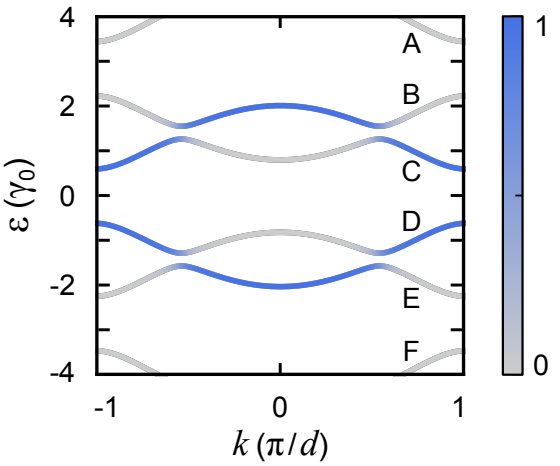


Figura 3.12: Espectro de cuasienergías para el modelo SSH bulk forzado ($\hbar\Omega = 2{,}8\gamma_0$ y $V_{\mathrm{ac}} \neq 0$) con $\delta = 0{,}3\gamma_0$. En el rango presentado se distinguen las réplicas de Floquet con $n = -1$, $n = 0$ y $n = 1$, sumando un total de 6 bandas denominadas, de mayor a menor energía, desde la A a la F. La escala de color indica el peso de cada estado sobre la réplica $n = 0$ (blanco da cuenta de la ausencia de estados).

Para el gap en $\varepsilon = 0$, la frecuencia seleccionada corresponde al régimen de alta frecuencia. En particular, podemos verificar que la suma de las fases de Zak de todas las bandas por debajo de dicho gap (bandas D, E y F) es igual a 0 si $|\gamma_1/\gamma_2| > 1$ (recordemos que una fase está definida a menos de 2π), mientras que $\mathcal{Z} = \pi$ si $|\gamma_1/\gamma_2| < 1$. Estos resultados están de acuerdo con el modelo SSH sin perturbar, donde el primer caso corresponde a un sistema trivial y el segundo a uno topológico. Además esta respuesta coincide con la ausencia o presencia de estados de borde determinada previamente (figura 3.11 (a) y (b)).

Si nos centramos ahora en el gap dinámico, las bandas por debajo de $\varepsilon = \hbar\Omega/2$ a considerar son las C, D, E y F. En este caso, la fase de Zak acumulada es igual a π independientemente de la topología del modelo nativo ($3\pi \equiv \pi \mod (2\pi)$ para el caso $|\gamma_1/\gamma_2| > 1$). Nuevamente este resultado coincide con la presencia de estados de borde de Floquet a dicha energía (figura 3.11 (d)). Es importante resaltar que en este caso nos encontramos en el régimen de baja frecuencia, lo que prueba que el cálculo realizado del invariante topológico es válido para el Hamiltoniano de Floquet aun bajo la aproximación de la limitación del número de réplicas consideradas.

Podemos extender el cálculo de la fase de Zak para todo el intervalo de frecuencias de la modulación temporal del modelo SSH consideradas previamente. En la figura 3.13 se presenta el valor de la fase acumulada hasta $\varepsilon = 0$, paneles (c) y (d), y $\varepsilon = \hbar\Omega/2$, (e) y (f), para el sistema nativo trivial ($|\gamma_1/\gamma_2| > 1$) y no trivial ($|\gamma_1/\gamma_2| < 1$) respectivamente. Con el objetivo de facilitar la comparación del invariante topológico con los estados de borde determinados en la sección anterior, en las figuras 3.13 (a) y (b) se muestran los espectros de cuasienergías de Floquet para un sistema semi-infinito (idénticas a las figuras 3.11 (a) y (b)).

A partir de las figuras podemos notar en primer lugar que los cambios en la fase de Zak acumulada ocurren exactamente a las frecuencias de los puntos de transición (ecuaciones 3.14, 3.15, 3.16 y 3.17). Además, comparando con los diagramas de estados electrónicos, resulta evidente que la modificación en el invariante topológico se corresponde con el cambio en la presencia de estados topológicos de borde. Considerando entonces ambos resultados, y asumiendo que la correspondencia bulk-borde se mantiene para todas las frecuencias, podemos resumir el comportamiento del sistema forzado a energía cero y a energía $\pm\hbar\Omega/2$ en el siguiente argumento: Cuando disminuimos la frecuencia de la modulación temporal, cada par de réplicas de Floquet nuevo que entra en (o sale de) juego a una dada energía agrega un π a la fase de Zak acumulada, cambiando por ende la topología del sistema de trivial (sin estados de borde) a topológica (con un estado localizado por borde) y viceversa.

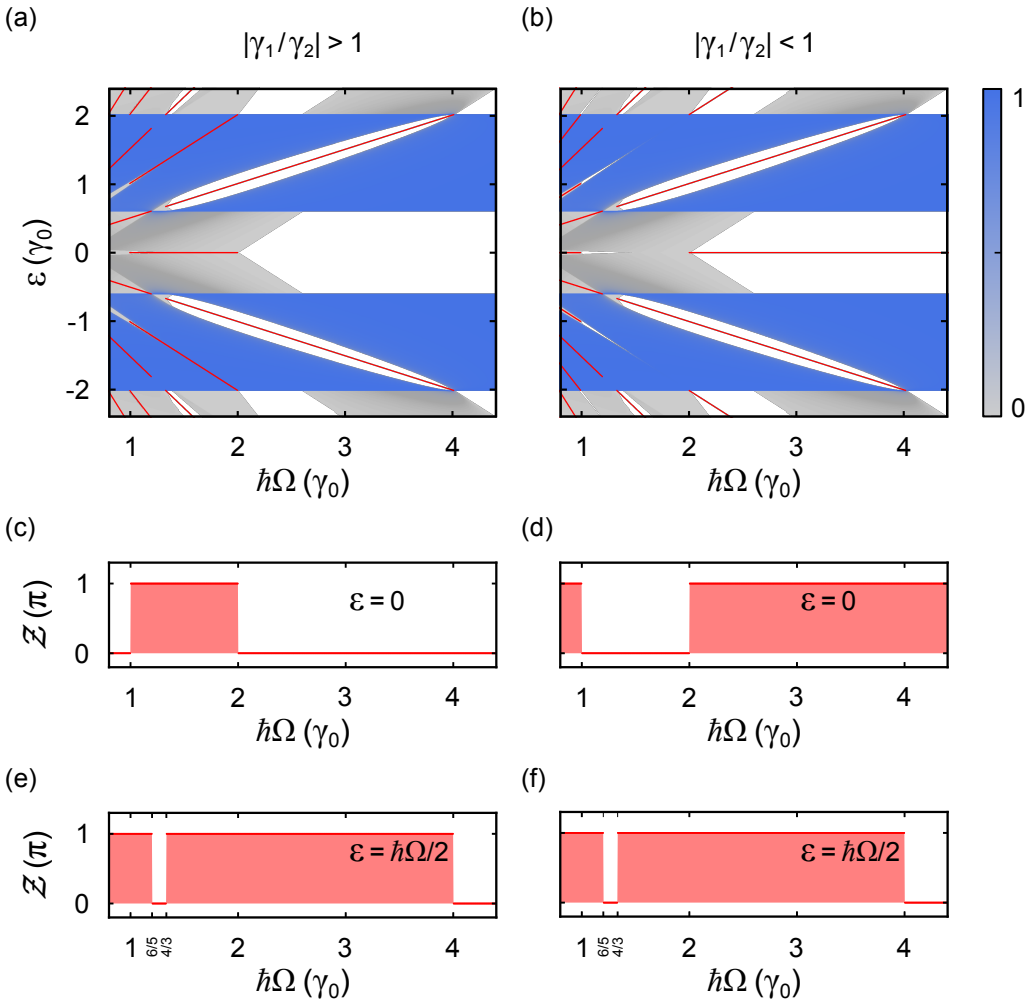


Figura 3.13: Espectro de cuasienergías para el modelo SSH semi-infinito forzado ($V_{\mathrm{ac}} \neq 0$) en función de la frecuencia de la perturbación dependiente del tiempo, para el sistema nativo (a) trivial ($\delta = 0{,}3\gamma_0$), y (b) topológico ($\delta = -0{,}3\gamma_0$), idéntico a la figura 3.11. Las fases de Zak calculadas considerando todas las bandas llenas por debajo de $\varepsilon = 0$ y $\varepsilon = \hbar\Omega/2$ se presentan en (c) y (d), y (e) y (f), respectivamente, para los sistemas correspondientes al espectro de la fila superior.

3.5. A modo de resumen

El modelo desarrollado por Su, Schrieffer y Heeger (SSH) para describir al poliacetileno dimerizado es uno de los más estudiados en el contexto de aislantes topológicos [145-147]. Esto se debe a su baja dimensionalidad (1D), lo cual implica una menor complejidad en la resolución de los cálculos teóricos, y a la posibilidad de adquirir dos fases topológicas diferentes. En el presente capítulo analizamos cómo las propiedades electrónicas y topológicas del modelo SSH se ven modificadas por la incorporación de una perturbación dependiente del tiempo.

Dada la periodicidad temporal de la modulación, empleamos la teoría de Floquet para determinar el espectro de cuasienergías del sistema. En primer lugar, se observó la apertura de nuevos gaps en la estructura electrónica a $\varepsilon = \pm\hbar\Omega/2$ producto del

cruce de las bandas asociadas a distintas réplicas de Floquet. Además, mediante la comparación entre los casos bulk y semi-infinito, así como el cálculo del módulo al cuadrado de la función de onda, se determinó la existencia de estados de borde localizados a la mitad del gap de energía. Interesantemente, estados de borde de Floquet pueden emerger en los nuevos gaps formados, mientras que aquellos en los gaps preexistentes pueden ser destruidos por la presencia de la perturbación temporal.

Estos resultados se complementaron con el cálculo de la fase de Zak, el invariante topológico pertinente para un sistema unidimensional [107]. Particularmente se observó que, cada vez que un par de réplicas de Floquet comienza a (o finaliza de) tener peso espectral a la energía de mitad del gap (ya sea el nativo o el de Floquet), la fase de Zak del mismo se modifica en π. De esta manera el sistema transiciona entre una fase trivial (sin estados de borde) y una topológica (con dos estados de borde) según la frecuencia de la modulación dependiente del tiempo.

En contraste con otros sistemas en los cuales se estudiaron transiciones topológicas generadas por una modulación temporal (como por ejemplo grafeno irradiado con luz laser [144, 209, 210]), el modelo SSH sin perturbar puede presentar de por sí estados topológicos de borde nativos, estando el número de los mismos restringido a dos posibles valores: 0 o 2. Los resultados obtenidos en el presente capítulo revelan la existencia de una competición entre esta topología y los diferentes procesos asistidos por “fotones” disponibles a una dada energía para fijar el carácter final de cada gap (sólo entre los últimos para el caso de $\varepsilon = \pm\hbar\Omega/2$). Esto implica que a través de una perturbación dependiente del tiempo es posible modificar controladamente la fase topológica del modelo SSH nativo.

Los resultados aquí presentados fueron publicados en el siguiente trabajo: V. Dal Lago, M. Atala y L. E. F. Foa Torres, «Floquet topological transitions in a driven one-dimensional topological insulator», Physical Review A **92**, 023624 (2015).

CAPÍTULO 4

TRANSPORTE DIRECCIONAL EN AISLANTES TOPOLÓGICOS BASADOS EN GRAFENO

La familia de materiales bidimensionales ha crecido sustancialmente desde de su inicio con el descubrimiento de grafeno [1, 23-25], incluyendo actualmente más de 200 miembros entre sustancias puras, dicalcogenuros, óxidos y otros [212]. En los últimos años sin embargo, el enfoque en el área de ciencia de los materiales ha virado hacia el diseño de sistemas tridimensionales. Utilizando diferentes materiales 2D como bloques de construcción, se fabrican muestras con propiedades diferentes a (y en muchos casos no alcanzables por) cada capa aislada. Estos nuevos sistemas reciben el nombre de heteroestructuras de van der Waals en honor a la fuerza débil que mantiene las distintas capas juntas [212, 213].

En los capítulos previos de esta tesis analizamos dos maneras diferentes de interactuar con los estados de borde topológicos de un sistema de baja dimensión. La primera de ellas se basa en la modificación de la estructura de la muestra a partir del agregado de defectos lineales (capítulo 2); mientras que la segunda corresponde a la incorporación de una perturbación dependiente del tiempo al sistema (capítulo 3). En el presente capítulo indagamos una tercera posibilidad fundada en la creación de una heteroestructura de van der Waals donde una de las capas es un aislante topológico.

El caso más sencillo de una heteroestructura de van der Waals es un sistema formado únicamente por dos capas débilmente acopladas, donde las interacciones intra-capa dominan respecto a las inter-capa. Un ejemplo es la bicapa de grafeno, para la cual la aplicación de un campo eléctrico externo perpendicular al plano de la misma genera la apertura de un gap en la estructura de bandas de ancho sintonizable [214-217]. Más aun, este gap puede albergar estados topológicos de borde de tipo marginal (estados similares a los topológicos pero con ciertas limitaciones) [218]. Este caso da cuenta de las nuevas propiedades electrónicas que se pueden adquirir en un sistema construido a partir del apilamiento de materiales bidimensionales respecto de las capas individuales.

Por otra parte, los sistemas bipartitos que involucran dos aislantes topológicos acoplados también presentan propiedades diferentes a las de cada material por

separado [15, 84, 219]. En este caso, la típica unión corresponde a una muestra al lado de la otra (en lugar de encima como sería en las heteroestructuras) donde, por la correspondencia bulk-borde, estados de borde robustos pueden desarrollarse [220]. Recientemente se demostró que estos estados pueden existir aun en sistemas donde la estructura electrónica no presenta un gap [221]. La misma conclusión se observó en sistemas fuera del equilibrio como son los aislantes topológicos de Floquet [144, 222, 223].

Consecuentemente, podemos cuestionarnos qué cambios se observarán en las propiedades electrónicas y de transporte de una bicapa de grafeno con un campo eléctrico externo aplicado, donde además una de las capas tiene propiedades de aislante topológico y la otra de metal (ausencia de gap) a la energía de interés. Para ello analizamos dos escenarios particulares: uno donde el sistema presenta un término de tipo Haldane (sección 1.2.3), que puede ser interpretado como una de las componentes de spin en un modelo con interacción spin-órbita intrínseca, y el otro donde la muestra se encuentra irradiada con luz láser circularmente polarizada.

En el primer caso, una capa sola del sistema presenta un gap en la estructura electrónica del bulk con estados quirales de tipo Hall que atraviesan el mismo y se propagan a través de los bordes [108]. Por el otro lado, monocapas de grafeno irradiadas con luz láser circularmente polarizada pueden albergar estados de borde quirales y robustos si los parámetros de la misma se eligen apropiadamente [116, 119, 133, 144, 224, 225]. Aun más, se ha probado que bicapas de grafeno irradiadas también pueden presentar estados de borde topológicos [126, 226].

En el presente capítulo nos centramos específicamente en el análisis de los estados de borde presentes en el aislante topológico de una heteroestructura de van der Waals y su interacción con los estados de la otra capa. Para ello estudiamos la estructura de bandas del sistema en su conjunto y los posibles cambios asociados en el transporte electrónico. Mostramos en particular que es posible obtener transporte direccional, apagando selectivamente uno de los estados de borde, en una configuración de *aislador* (isolator). Esta noción proviene de la fotónica [227] y la adaptamos para denominar a un dispositivo donde el transporte sólo es posible desde un cable al otro pero no en la dirección opuesta mientras que la reflexión en el propio cable es nula. Por lo tanto, la bicapa de grafeno con un campo eléctrico externo y una perturbación que transforma a una de las capas en aislante topológico mientras que la otra permanece de carácter metálico a la energía de interés, representa un prototipo conceptual de un aislador electrónico.

4.1. Modelo atomístico

Para comenzar nuestro estudio, definimos el modelo atomístico a emplear en los cálculos computacionales. Específicamente modelamos una bicapa de grafeno con apilamiento de tipo Bernal bajo la acción de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra (figura 4.1) y de una perturbación que convierte a una de las capas en

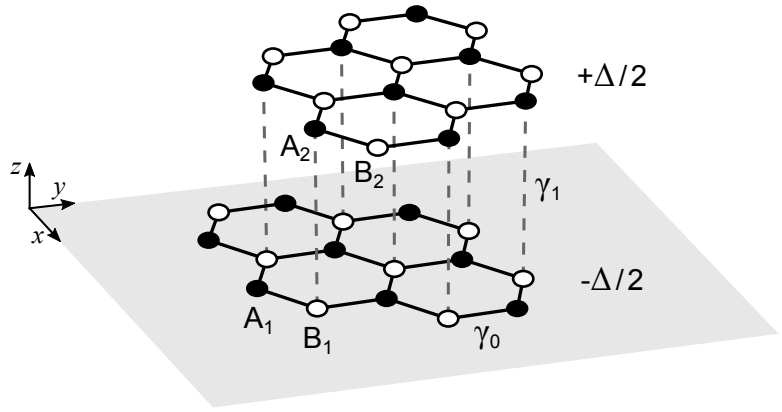


Figura 4.1: Esquema de una bicapa de grafeno con apilamiento de tipo Bernal y bajo la acción de un campo eléctrico externo perpendicular a la misma (determinado por Δ). Los sitios de tipo A y B están marcados en negro y blanco, respectivamente, y el acoplamiento entre las dos capas γ_1 une los sitios B_1 y A_2.

un aislante topológico. En términos generales, el Hamiltoniano de tipo tight-binding puede descomponerse en tres sumandos fundamentales:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{grafeno}} + \mathcal{H}_{\perp} + \mathcal{H}_{\text{perturbación}} \tag{4.1}$$

El primer término, $\mathcal{H}_{\text{grafeno}}$, corresponde al Hamiltoniano propio del grafeno para cada capa por separado (ecuación 1.5, sección 1.1.2):

$$\mathcal{H}_{\text{grafeno}} = \sum_i E_i \, c_i^\dagger c_i - \sum_{\langle i,j \rangle} \gamma_{i,j} c_i^\dagger c_j + \text{c.h.} \tag{4.2}$$

donde $c_i^\dagger$ y c_i son los operadores de creación y aniquilación electrónica en el orbital π del sitio i. Los sitios pueden ser de tipo A o B y se individualizan en función de la capa en la que estén localizados: A_1 y B_1 para la capa inferior y A_2 y B_2 para la superior (figura 4.1). La sumatoria del segundo término del lado derecho de la igualdad 4.2 se realiza sobre todos los sitios vecinos más próximos entre sí (primeros vecinos), para los cuales los elementos de matriz de hopping asociados son $\gamma_{i,j}$. Para una monocapa de grafeno y en ausencia de otra perturbación externa, $\gamma_{i,j} = \gamma_0 = 2{,}7$ eV [6, 25], valor que se utiliza como unidad de energía en el resto de la sección. Por otra parte, en $\mathcal{H}_{\text{grafeno}}$ se incluye un corrimiento en la energía de los sitios en las capas inferior ($E_i = E_0 - \Delta/2$) y superior ($E_i = E_0 + \Delta/2$) que simula la acción del bias aplicado perpendicularmente a la muestra. Sin pérdida de generalidad, la energía E_0 se define igual a cero, fijando así la referencia. Por último, c.h. representa el conjugado Hermitiano del término anterior.

En la ecuación 4.1, el segundo término del lado derecho ($\mathcal{H}_{\perp}$) corresponde al Hamiltoniano de interacción entre las dos capas del sistema. Particularmente en el presente modelo, los sitios B_1 (de la capa inferior) y A_2 (de la superior) están vinculados a través del elemento de matriz de hopping γ_1 (figura 4.1). Este acoplamiento tiene un valor menor a γ_0 (en general, en ausencia de otras perturbaciones se define

entre $0{,}1 - 0{,}15\gamma_0$ [214]), tal como se describió para las heteroestructuras de van der Waals donde las interacciones intra-capa son más fuertes que las inter-capa.

El último término de la igualdad 4.1, $\mathcal{H}_{\text{perturbación}}$, representa la perturbación externa que se incorpora en el sistema con el objetivo de transformar a una de las capas en un aislante topológico. En el presente capítulo, como se detalló en la introducción, analizaremos dos casos particulares: uno donde se incluye un término de acoplamiento de tipo Haldane [108] (o bien de spin-órbita intrínseco), y otro en el cual la bicapa de grafeno es irradiada con luz láser circularmente polarizada.

4.1.1. Bicapa de grafeno con acoplamiento tipo Haldane

Consideramos en primer lugar una bicapa de grafeno con un bias perpendicular a la misma a la cual se le agrega un término de acoplamiento de tipo Haldane [108]. El Hamiltoniano tight-binding para este sistema está dado por la ecuación 4.1, donde la interacción de Haldane está definida según:

$$\mathcal{H}_{\text{perturbación}} = -\mathrm{i}\gamma_H \sum_{\langle\langle i,j\rangle\rangle} \nu_{i,j} c_i^\dagger c_j \tag{4.3}$$

En este caso el índice de la sumatoria varía sobre todos los pares de sitios que son vecinos a segundo grado entre sí (figura 4.2) y en ambos sentidos (del sitio i al j y viceversa). La constante γ_H da cuenta del valor del acoplamiento de Haldane, mientras que $\nu_{i,j}$ es una variable igual a $+1$ (-1) si el camino desde el sitio j al sitio i es horario (antihorario).

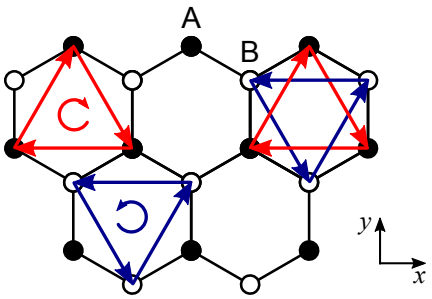


Figura 4.2: Esquema del modelo de Haldane, donde los acoplamientos complejos a segundos vecinos se indican en flechas rojas y azules según el signo de la fase.

La interacción de Haldane implica entonces la incorporación, al sistema de bicapa de grafeno prístino, de un término de acoplamiento imaginario entre sitios vecinos a segundo orden [108]. Por el contrario, los hoppings a primeros vecinos ($\gamma_{i,j}$ incluido en $\mathcal{H}_{\text{grafeno}}$) permanecen inalterados, siendo su valor igual a γ_0.

Este modelo permite introducir las ideas generales y al mismo tiempo tiene su representación realística en el caso de un sistema bicapa de grafeno con un bias perpedicular y un término de acoplamiento spin-órbita intrínseco. Este último corresponde a dos copias del sistema sin spin considerado previamente (con términos de Haldane), una para cada spin s_z, pero con fases opuestas en el término de hopping a segundos vecinos. Específicamente el Hamiltoniano tight-binding completo

del sistema es [228, 229]:

$$\mathcal{H} = \sum_{i,s_z} E_i \, c^{\dagger}_{i,s_z} c_{i,s_z} - \gamma_0 \sum_{\langle i,j\rangle,s_z} c^{\dagger}_{i,s_z} c_{j,s_z} + \mathcal{H}_{\perp} - \mathrm{i}\,\gamma_{SO} \sum_{\langle\langle i,j\rangle\rangle,s_z} \nu_{i,j}\, s_z\, c^{\dagger}_{i,s_z} c_{j,s_z} \tag{4.4}$$

donde $c^{\dagger}_{i,s_z}$ y c_{i,s_z} son los operadores de creación y aniquilación electrónica en el orbital π del sitio i con spin para arriba $s_z = +1$ o spin para abajo $s_z = -1$. Las sumatorias se realizan, en este caso, sobre todos los pares de sitios vecinos a primer o segundo orden (indicado por el número de corchetes) y en ambos sentidos (del sitio i al j y viceversa).

Si desglosamos la ecuación 4.4 para cada spin por separado, la igualdad resultante es análoga a la ecuación 4.3 (evaluada en la 4.1). La principal diferencia queda manifiesta al considerar el sistema total, donde para cada spin el término a segundos vecinos tiene signo opuesto (dado por s_z). Por otra parte, el hopping a segundos vecinos está definido en este caso por γ_{SO}, que corresponde al valor del acoplamiento de spin-órbita para cada material.

El modelo con acoplamientos tipo Haldane considerado previamente es, por lo tanto, una representación teórica para un único spin del sistema bicapa de grafeno con bias e interacción spin-órbita intrínseca. Debido a la menor complejidad del primero (por el menor número de variables a considerar), entre ambos casos, en el resto del presente capítulo nos centraremos principalmente en el sistema con términos de Haldane.

Por otra parte, para evitar reflexiones indeseadas producto de un cambio brusco en las condiciones experimentales del sistema, los dispositivos multiterminales simulados son del tipo “todo grafeno”. Esto implica que tanto los cables como la muestra propiamente dicha están formados por cintas de grafeno (en particular, la muestra es una cinta con bordes zigzag). El término de Haldane se incorpora en todo el sistema (incluidos los cables), al igual que el campo eléctrico externo perpendicular al plano de la muestra.

4.1.2. Bicapa de grafeno irradiada

Definimos ahora el modelo de una bicapa de grafeno, con un bias aplicado e irradiada perpendicularmente al plano de la misma con luz láser de polarización circular. El Hamiltoniano tipo tight-binding para este sistema está dado por la ecuación 4.1 con $\mathcal{H}_{\text{perturbación}} = 0$. La perturbación externa se incorpora en este caso a través de la sustitución de Peierls [179] como una fase dependiente del tiempo en los elementos de matriz de hopping a primeros vecinos [142, 230]:

$$\gamma_{ij}(t) \;=\; \gamma_0 \exp\left[\mathrm{i}\cdot\frac{2\pi}{\Phi_0}\int_{\mathbf{r}_j}^{\mathbf{r}_i} \mathbf{A}(t)\; d\mathbf{r}\right] \tag{4.5}$$

donde $\mathbf{A}(t)$ corresponde al potencial vector de la radiación y Φ_0 al cuanto de flujo magnético. Para una onda plana monocromática y circularmente polarizada (como es el caso de la luz láser) que se propaga en la dirección z (perpendicular a la hoja de

grafeno) el potencial vector asociado es $\mathbf{A}(t) = A_0\,(\mathrm{sen}(\Omega t)\;\hat{x} + \cos(\Omega t)\;\hat{y})$, donde A_0 da cuenta de la amplitud de la onda de la radiación y Ω de su frecuencia.

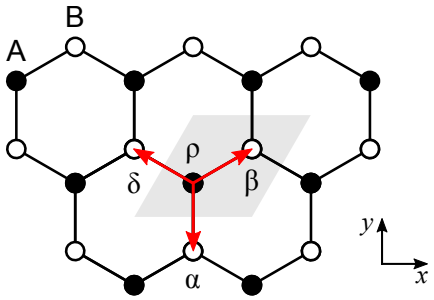


Figura 4.3: Esquema del grafeno donde se indican con flechas rojas los tres sitios inequivalentes de tipo B (α, β y δ) vecinos al sitio ρ de tipo A.

De la ecuación 4.5 se desprende que el valor de $\gamma(t)$ depende de la posición ($\mathbf{r}$) de cada par de sitios vecinos considerado. En una monocapa de grafeno existen tres pares inequivalentes (flechas rojas en la figura 4.3) para los cuales podemos determinar el nuevo valor de hopping. Definiendo el origen del sistema de coordenadas en el sitio A denominado ρ (figura 4.3), la ubicación del sitio B_β es $(0{,}5\;a; l)$ con $l = \sqrt{0{,}25/3}\;a$ y a el módulo del vector de red en grafeno. Por lo tanto los elementos de matriz de hopping individuales son:

$$\begin{aligned}\gamma_{\alpha\rho}(t) &= \gamma_0 \exp\left[\mathrm{i}\cdot\frac{2\pi}{\Phi_0}A_0\left\{\sin(\Omega t)(0a-0a)+\cos(\Omega t)(-2l-0a)\right\}\right]\\ \gamma_{\alpha\rho}(t) &= \gamma_0 \exp\left[-\mathrm{i}\cdot\frac{2l}{a}\;z_{\mathrm{rad}}\;\cos(\Omega t)\right]\end{aligned} \tag{4.6}$$

$$\begin{aligned}\gamma_{\beta\rho}(t) &= \gamma_0 \exp\left[\mathrm{i}\cdot\frac{2\pi}{\Phi_0}A_0\left\{\sin(\Omega t)(0{,}5a-0a)+\cos(\Omega t)(l-0a)\right\}\right]\\ \gamma_{\beta\rho}(t) &= \gamma_0 \exp\left[\mathrm{i}\cdot 0{,}5\;z_{\mathrm{rad}}\;\sin(\Omega t)+\mathrm{i}\cdot\frac{l}{a}\;z_{\mathrm{rad}}\;\cos(\Omega t)\right]\end{aligned} \tag{4.7}$$

$$\begin{aligned}\gamma_{\delta\rho}(t) &= \gamma_0 \exp\left[\mathrm{i}\cdot\frac{2\pi}{\Phi_0}A_0\left\{\sin(\Omega t)(-0{,}5a-0a)+\cos(\Omega t)(l-0a)\right\}\right]\\ \gamma_{\delta\rho}(t) &= \gamma_0 \exp\left[-\mathrm{i}\cdot 0{,}5\;z_{\mathrm{rad}}\;\sin(\Omega t)+\mathrm{i}\cdot\frac{l}{a}\;z_{\mathrm{rad}}\;\cos(\Omega t)\right]\end{aligned} \tag{4.8}$$

donde $z_{\mathrm{rad}} = 2\pi A_0 a/\Phi_0$ es un parámetro adimensional que representa la intensidad de la radiación. Es importante resaltar que, para el cálculo de los hoppings del sistema irradiado, sólo fue necesario utilizar la posición relativa del par de sitios involucrado. Por lo que, si bien en la bicapa de grafeno con apilamiento de tipo Bernal, los sitios A y B no están directamente por encima (o por debajo) del mismo sitio de

la otra capa, el resultado final del acoplamiento se mantiene. Por otra parte, en el caso del hopping inter-capa, la variación de γ_1 por la acción de la luz láser puede considerarse despreciable debido a que la dirección de propagación de la radiación es paralela al acoplamiento propiamente dicho.

La perturbación externa empleada es periódica en el tiempo, como se desprende de la definición de $\mathbf{A}(t)$ (con $T = 2\pi/\Omega$). Esta periodicidad se refleja en los términos de acoplamiento a primeros vecinos (ecuaciones 4.6, 4.7 y 4.8), y en consecuencia en el Hamiltoniano del sistema. Por lo tanto, es posible emplear la teoría de Floquet [120] en la resolución del mismo (sección 3.1).

Teoría de Floquet aplicada al modelo atomístico

Las propiedades espectrales y de transporte de la bicapa de grafeno bajo la acción de un campo eléctrico perpendicular a la misma e irradiada con luz láser circularmente polarizada pueden calcularse a partir del Hamiltoniano de Floquet independiente del tiempo ($\mathcal{H}_F = \mathcal{H} - \mathrm{i}\hbar\partial_t$, sección 3.1). Para ello comenzamos planteando el sistema en el espacio de Floquet de producto directo ($\mathscr{R} \otimes \mathscr{T}$) [206].

La bicapa de grafeno irradiada con luz láser puede describirse teóricamente como un número infinito de réplicas de Floquet idénticas del sistema (figura 4.4, sólo se muestra una de las monocapas para mayor claridad del gráfico). Cada una de estas copias difiere de las otras en múltiplos enteros de energía según $\varepsilon_n = \varepsilon + n\hbar\Omega$ (ecuación 3.5) donde n define el subespacio de la n-ésima réplica de Floquet en consideración [205]. Este índice puede ser interpretado como el número de excitaciones “fotónicas” en la muestra. De esta manera el sistema formado por la bicapa de grafeno adquiere un grado mayor de dimensión.

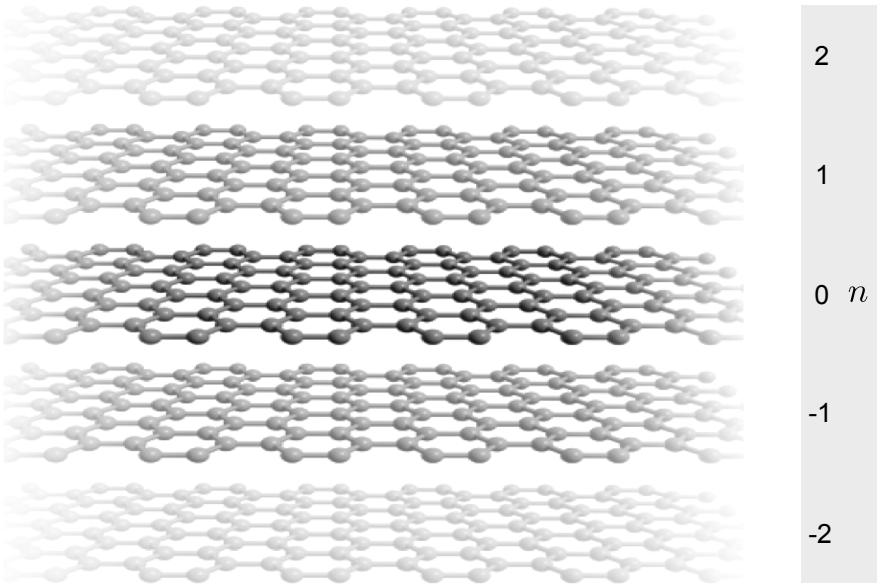


Figura 4.4: Representación esquemática de las réplicas de Floquet con n desde -2 a $+2$ de una monocapa de grafeno irradiada con luz láser.

En la sección 3.1 vimos que las diferentes réplicas de Floquet están acopladas entre sí a través de las componentes de Fourier de los elementos de matriz de hopping. Dado que sólo los acoplamientos intra-capa dependen del tiempo, las capas inferiores de las distintas copias interactuarán entre sí (y lo mismo sucederá con las superiores). Por lo tanto para determinar el Hamiltoniano de Floquet del sistema debemos comenzar calculando cada una de las n componentes de Fourier ($n \in \mathbb{Z}$) de $\gamma_{ij}(t)$:

$$\gamma_{ij}^{n} = \frac{1}{T}\int_{0}^{T} \gamma_{ij}(t)\, e^{-\mathrm{i}n\Omega t}\, dt \tag{4.9}$$

Reemplazando con las ecuaciones 4.6, 4.7 y 4.8 para cada uno de los tres pares de sitios vecinos inequivalentes en el sistema, se obtiene:

$$\begin{aligned}
\gamma_{\alpha\rho}^{n} &= \frac{1}{T}\int_{0}^{T} \gamma_0\, e^{-\mathrm{i}\frac{2l}{a} z_{\mathrm{rad}}\, \cos(\Omega t)}\, e^{-\mathrm{i}n\Omega t}\, dt \\
\gamma_{\beta\rho}^{n} &= \frac{1}{T}\int_{0}^{T} \gamma_0\, e^{\left[\mathrm{i}\,0{,}5\, z_{\mathrm{rad}}\, \sin(\Omega t) + \mathrm{i}\frac{l}{a} z_{\mathrm{rad}}\, \cos(\Omega t)\right]}\, e^{-\mathrm{i}n\Omega t}\, dt \\
\gamma_{\delta\rho}^{n} &= \frac{1}{T}\int_{0}^{T} \gamma_0\, e^{\left[-\mathrm{i}\,0{,}5\, z_{\mathrm{rad}}\, \sin(\Omega t) + \mathrm{i}\frac{l}{a} z_{\mathrm{rad}}\, \cos(\Omega t)\right]}\, e^{-\mathrm{i}n\Omega t}\, dt
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Para resolver estas intregrales podemos utilizar las expansiones de Anger-Jacobi:

$$\begin{aligned}
e^{\mathrm{i}x\cos(\theta)} &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathrm{i}^m J_m(x)\, e^{\mathrm{i}m\theta} \\
e^{\mathrm{i}x\sin(\theta)} &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(x)\, e^{\mathrm{i}m\theta}
\end{aligned}$$

donde $J_m(x)$ es la función de Bessel de orden m evaluada en x. De esta manera:

$$\begin{aligned}
\gamma_{\alpha\rho}^{n} &= \frac{1}{T}\int_{0}^{T} \gamma_0 \left[\sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathrm{i}^m J_m\left(-\frac{2l}{a} z_{\mathrm{rad}}\right) e^{\mathrm{i}m\Omega t}\right] e^{-\mathrm{i}n\Omega t}\, dt \\
\gamma_{\alpha\rho}^{n} &= \frac{\gamma_0}{T} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathrm{i}^m J_m\left(-\frac{2l}{a} z_{\mathrm{rad}}\right) \int_{0}^{T} e^{\mathrm{i}m\Omega t}\, e^{-\mathrm{i}n\Omega t}\, dt \\
\gamma_{\alpha\rho}^{n} &= \frac{\gamma_0}{T} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathrm{i}^m J_m\left(-\frac{2l}{a} z_{\mathrm{rad}}\right) \frac{2\pi}{\Omega}\delta(m-n) \\
\gamma_{\alpha\rho}^{n} &= \gamma_0\, \mathrm{i}^n J_n\left(-\frac{2l}{a} z_{\mathrm{rad}}\right)
\end{aligned} \tag{4.11}$$

$$
\begin{aligned}
\gamma_{\beta\rho}^{n} &= \frac{1}{T}\int_0^T \gamma_0 \left[\sum_{k=-\infty}^{\infty} J_k\left(\mathrm{i}\,0{,}5\,z_{\mathrm{rad}}\right)\, e^{\mathrm{i}k\Omega t}\right]\left[\sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathrm{i}^m J_m\left(\mathrm{i}\frac{l}{a}\,z_{\mathrm{rad}}\right)\, e^{\mathrm{i}m\Omega t}\right] e^{-\mathrm{i}n\Omega t}\, dt \\
\gamma_{\beta\rho}^{n} &= \frac{\gamma_0}{T}\sum_{k=-\infty}^{\infty}\sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathrm{i}^m\, J_k\left(\mathrm{i}\,0{,}5\,z_{\mathrm{rad}}\right)\, J_m\left(\mathrm{i}\frac{l}{a}\,z_{\mathrm{rad}}\right)\int_0^T e^{\mathrm{i}k\Omega t}\, e^{\mathrm{i}m\Omega t}\, e^{-\mathrm{i}n\Omega t}\, dt \\
\gamma_{\beta\rho}^{n} &= \frac{\gamma_0}{T}\sum_{m=-\infty}^{\infty}\sum_{k=-\infty}^{\infty} \mathrm{i}^m\, J_k\left(\mathrm{i}\,0{,}5\,z_{\mathrm{rad}}\right)\, J_m\left(\mathrm{i}\frac{l}{a}\,z_{\mathrm{rad}}\right)\frac{2\pi}{\Omega}\delta(k+m-n) \\
\gamma_{\beta\rho}^{n} &= \gamma_0 \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathrm{i}^m\, J_{n-m}\left(\mathrm{i}\,0{,}5\,z_{\mathrm{rad}}\right)\, J_m\left(\mathrm{i}\frac{l}{a}\,z_{\mathrm{rad}}\right)
\end{aligned}
\tag{4.12}
$$

$$
\begin{aligned}
\gamma_{\delta\rho}^{n} &= \frac{1}{T}\int_0^T \gamma_0 \left[\sum_{k=-\infty}^{\infty} J_k\left(-\mathrm{i}\,0{,}5\,z_{\mathrm{rad}}\right)\, e^{\mathrm{i}k\Omega t}\right]\left[\sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathrm{i}^m J_m\left(\mathrm{i}\frac{l}{a}\,z_{\mathrm{rad}}\right)\, e^{\mathrm{i}m\Omega t}\right] e^{-\mathrm{i}n\Omega t}\, dt \\
\gamma_{\delta\rho}^{n} &= \frac{\gamma_0}{T}\sum_{k=-\infty}^{\infty}\sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathrm{i}^m\, J_k\left(-\mathrm{i}\,0{,}5\,z_{\mathrm{rad}}\right)\, J_m\left(\mathrm{i}\frac{l}{a}\,z_{\mathrm{rad}}\right)\int_0^T e^{\mathrm{i}k\Omega t}\, e^{\mathrm{i}m\Omega t}\, e^{-\mathrm{i}n\Omega t}\, dt \\
\gamma_{\delta\rho}^{n} &= \frac{\gamma_0}{T}\sum_{m=-\infty}^{\infty}\sum_{k=-\infty}^{\infty} \mathrm{i}^m\, J_k\left(-\mathrm{i}\,0{,}5\,z_{\mathrm{rad}}\right)\, J_m\left(\mathrm{i}\frac{l}{a}\,z_{\mathrm{rad}}\right)\frac{2\pi}{\Omega}\delta(k+m-n) \\
\gamma_{\delta\rho}^{n} &= \gamma_0 \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathrm{i}^m\, J_{n-m}\left(-\mathrm{i}\,0{,}5\,z_{\mathrm{rad}}\right)\, J_m\left(\mathrm{i}\frac{l}{a}\,z_{\mathrm{rad}}\right)
\end{aligned}
\tag{4.13}
$$

donde $\delta(x)$ corresponde a la función delta de Kronecker. Las ecuaciones 4.12 y 4.13 se pueden simplificar empleando la identidad [231]:

$$
e^{-\mathrm{i}\nu\Lambda}\, J_\nu(\Gamma) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_{\nu+m}(\chi)\, J_m(\xi)\, e^{-i\phi m} \tag{4.14}
$$

con $\Gamma = \sqrt{\chi^2+\xi^2-2\chi\xi\cos(\phi)}$ y $\Lambda = \arctan(\xi\sin(\phi)/\{\chi-\xi\cos(\phi)\})$. Luego, utilizando la propiedad de las funciones de Bessel $J_{-k}(x) = (-1)^k J_k(x)$, y las identidades de Euler $(\exp(\mathrm{i}\pi)+1=0)$ e $\mathrm{i} = \exp(\mathrm{i}\pi/2)$, obtenemos para $\gamma_{\beta\rho}^{n}$:

$$
\begin{aligned}
\gamma_{\beta\rho}^{n} &= \gamma_0 \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{\mathrm{i}\frac{\pi}{2}m}\, e^{\mathrm{i}\pi(m-n)}\, J_{m-n}\left(\mathrm{i}\,0{,}5\,z_{\mathrm{rad}}\right)\, J_m\left(\mathrm{i}\frac{l}{a}\,z_{\mathrm{rad}}\right) \\
\gamma_{\beta\rho}^{n} &= \gamma_0\, e^{-\mathrm{i}\pi n} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{\mathrm{i}\frac{3\pi}{2}m}\, J_{m-n}\left(\mathrm{i}\,0{,}5\,z_{\mathrm{rad}}\right)\, J_m\left(\mathrm{i}\frac{l}{a}\,z_{\mathrm{rad}}\right)
\end{aligned}
$$

$$\gamma_{\beta\rho}^{n} \;=\; \gamma_0\, e^{-\mathrm{i}\pi n}\; \exp\left[-\mathrm{i}(-n)\arctan\left(\frac{\left(\mathrm{i}\frac{l}{a}\,z_{\mathrm{rad}}\right)\,\sin\left(-\frac{3\pi}{2}\right)}{\left(\mathrm{i}\,0{,}5\,z_{\mathrm{rad}}\right)\,-\,\left(\mathrm{i}\frac{l}{a}\,z_{\mathrm{rad}}\right)\,\cos\left(-\frac{3\pi}{2}\right)}\right)\right]\times$$

$$J_{-n}\left(\sqrt{\left(\mathrm{i}\,0{,}5\,z_{\mathrm{rad}}\right)^2+\left(\mathrm{i}\frac{l}{a}\,z_{\mathrm{rad}}\right)^2-2\,\left(\mathrm{i}\,0{,}5\,z_{\mathrm{rad}}\right)\left(\mathrm{i}\frac{l}{a}\,z_{\mathrm{rad}}\right)\cos\left(-\frac{3\pi}{2}\right)}\right)$$

$$\gamma_{\beta\rho}^{n} \;=\; \gamma_0\,(-1)^n\;\exp\left[\mathrm{i}\,n\arctan\frac{2l}{a}\right]J_{-n}\left(\sqrt{\left(\mathrm{i}\,0{,}5\,z_{\mathrm{rad}}\right)^2+\left(\mathrm{i}\frac{l}{a}\,z_{\mathrm{rad}}\right)^2}\right)$$

$$\gamma_{\beta\rho}^{n} \;=\; \gamma_0\;\exp\left[\mathrm{i}\,n\,\frac{\pi}{6}\right]J_n\left(\frac{|z_{\mathrm{rad}}|}{\sqrt{3}}\right) \tag{4.15}$$

Análogamente, podemos calcular la expresión simplificada para $\gamma_{\delta\rho}^{n}$:

$$\gamma_{\delta\rho}^{n} \;=\; \gamma_0\;\exp\left[-\mathrm{i}\,n\,\frac{\pi}{6}\right]J_n\left(\frac{|z_{\mathrm{rad}}|}{\sqrt{3}}\right) \tag{4.16}$$

De esta manera quedan determinadas todas las componentes de Fourier de los elementos de matriz de hopping en la bicapa de grafeno irradiada perpendicularmente al plano con luz láser circularmente polarizada. Por lo tanto tenemos definido el sistema completamente en el espacio de Floquet en su versión atomística e independiente del tiempo.

Por otra parte, y al igual que para el sistema de bicapa de grafeno con términos de Haldane, los dispositivos multiterminales simulados son del tipo “todo grafeno”. De esta manera se intenta evitar la existencia de reflexiones indeseadas producto de un cambio brusco en las condiciones experimentales del sistema. Sin embargo, en contraste con el caso de Haldane, los cables no presentan ningún tipo de perturbación externa (irradiación con luz láser o la acción de un campo eléctrico perpendicular). Por lo tanto para disminuir los efectos de unión entre los cables y el sistema, tanto el bias como la radiación se apagan suavemente en un primer fragmento de los cables por fuera de la muestra.

4.1.3. Parámetros empleados en las simulaciones computacionales

Las propiedades espectrales y de transporte de la bicapa de grafeno con un bias perpendicular y un término de acoplamiento tipo Haldane se obtuvieron a partir de cálculos computacionales donde el acoplamiento intercapa es de $\gamma_1 = 0{,}15\gamma_0$. Además, el campo eléctrico externo se incorporó a través de la modulación de la energía de los sitios con $\Delta = -0{,}5\gamma_0$ (figura 4.1) y la interacción de Haldane es de $\gamma_H = -0,05\gamma_0$. Para determinar la estructura electrónica del sistema se empleó una cinta infinita de ancho $W = 104\,a = 25{,}6$ nm; mientras que para los cálculos de transporte se modeló una muestra finita cuyo largo es $L = 510\,a = 125{,}4$ nm.

En el caso de la bicapa de grafeno irradiada con luz láser circularmente polarizada y bajo la acción de un campo eléctrico perpendicular externo, se emplearon en las

simulaciones computacionales los parámetros $\gamma_1 = 0{,}1\gamma_0$ y $\Delta = 0{,}2\gamma_0$. El tamaño del sistema elegido fue de $W = 103\,a = 25{,}3$ nm y $L = 500\,a = 123{,}0$ nm tanto para el cálculo de las propiedades espectrales (aunque en este caso la cinta era de largo infinito) como de transporte.

Por otra parte, en relación a la radiación electromagnética, la frecuencia utilizada fue de $\Omega = 3{,}5\gamma_0/\hbar$, mientras que la intensidad A_0 quedó cifrada en el valor escogido de $z_{\mathrm{rad}} = 2\pi A_0\, a/\Phi_0 = 0{,}5$. Como se desarrolló en la sección 3.1, el espacio de Fourier de las funciones periódicas en el tiempo (y por consiguiente el de Floquet) es infinito. Por ende, es necesario determinar un subespacio del mismo para las simulaciones computaciones, manteniendo siempre aquellas que son relevantes a la energía de interés. Debido a que nos interesa estudiar el sistema a energías cercanas a cero, a que el ancho de la banda en grafeno es de $6\gamma_0$ y a que la frecuencia de la radiación elegida es alta (comparando su energía asociada con el ancho de banda del grafeno), los resultados presentados en el resto del capítulo se obtuvieron utilizando 5 réplicas de Floquet (desde $n = -2$ a $n = 2$).

Como se describió anteriormente, la radiación con luz láser y el bias perpendicular se apagan suavemente por fuera de la muestra (A_0 y Δ se anulan en un primer fragmento de los cables) con el objetivo de disminuir los efectos de unión entre el sistema y los cables. Específicamente la extinción se modeló con una función tangente hiperbólica desplazada $50\,a$ desde la unión con el cable hacia fuera de la muestra en el eje x (el perfil de la misma se presenta en la figura 4.5). En el caso de los cables verticales del dispositivo multiterminal, el apagado de la perturbación externa se realizó en un fragmento de los mismos de largo $50\,a$ manteniendo la función y el perfil de extinción respecto del borde entre dicho fragmento y el resto del cable.

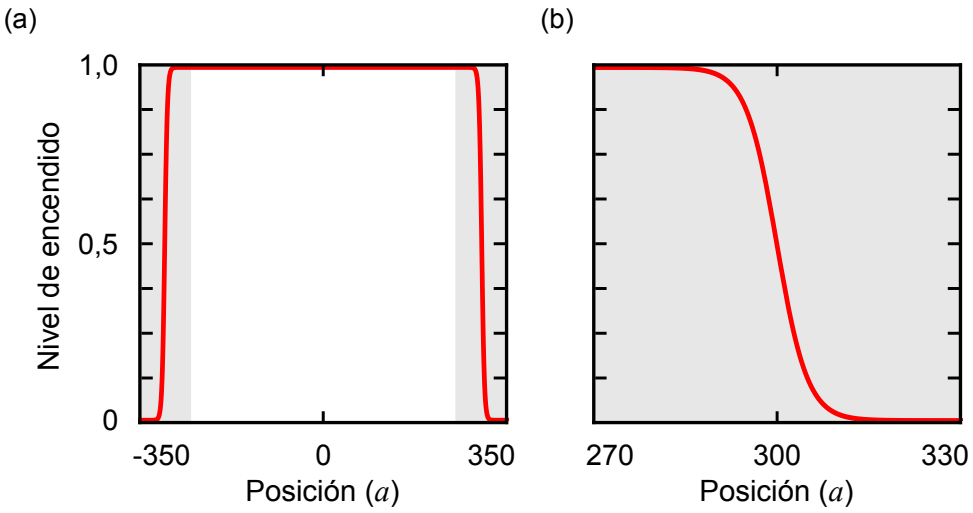


Figura 4.5: (a) Curva de encendido de la radiación láser y el campo eléctrico externo en función de la posición en el sistema formado por la muestra (área blanca) y parte de los cables (área gris). (b) Acercamiento de la curva (a) en la región de los cables donde se observa en mayor detalle la variación suave dada por la función tangente hiperbólica.

4.2. Estructura electrónica

En la presente sección estudiamos la estructura de bandas de los sistemas bicapa de grafeno antes descriptos. Sabemos que una monocapa de grafeno con acoplamientos de tipo Haldane presenta una fase tipo Hall cuántica entera con estados de borde quirales robustos y perfectamente transmisores (sección 1.2.3). Esta respuesta también se observa para la misma muestra en otras situaciones de no-equilibrio [116, 118], como puede ser el caso del sistema irradiado con luz láser para el cual estados de borde de Floquet emergen en el espectro [116, 117, 119, 133, 224, 225]. Aún más, las bicapas de grafeno bajo la acción de radiación electromagnética han probado albergar estados de borde quirales cuando los parámetros del láser son elegidos apropiadamente [126, 226]. Estos estados topológicos son la base de nuestro análisis para la obtención de transporte unidireccional.

El segundo componente en juego en los modelos presentados (sección 4.1) es el campo eléctrico externo aplicado de manera perpendicular a la bicapa de grafeno. Se conoce que el mismo genera la apertura de un gap en la estructura de bandas del sistema cuyo ancho puede ser sintonizado con la fuerza de la perturbación (figura 4.6 (a) para $\Delta = 0$, y (b) para $\Delta = -0{,}5\gamma_0$) [214-217]. Esto se debe a que, además de romper con la simetría de inversión, el voltaje de bias desplaza las bandas de energía de cada capa. De esta manera, si analizamos el espectro para cada capa por separado, observamos además del gap a energía cero, un gap más pequeño a la energía de sitio correspondiente (figura 4.7). Es decir, existen regiones de energía donde una de las capas tiene características metálicas (un espectro continuo), mientras que la otra no presenta estados electrónicos (o sólo presenta los de borde).

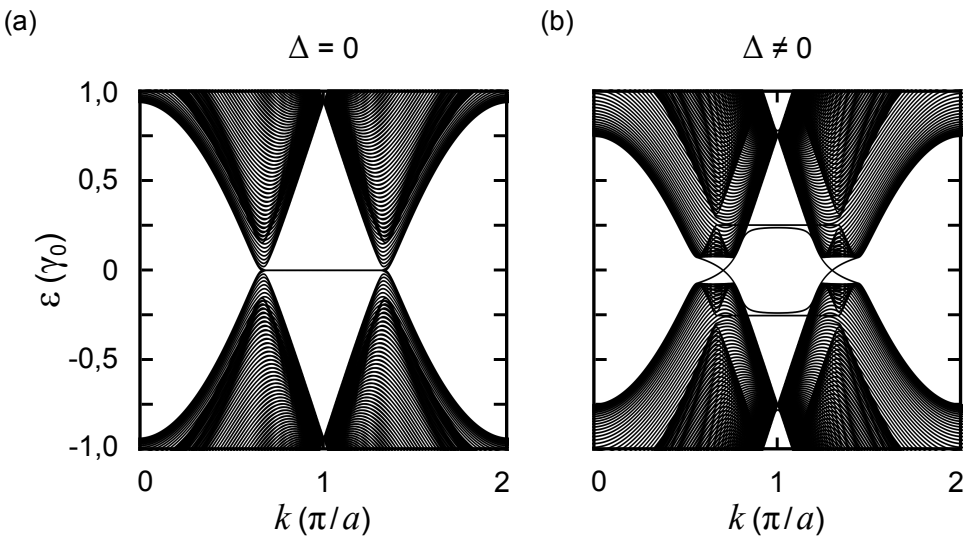


Figura 4.6: Estructura electrónica de una bicapa de grafeno con apilamiento de tipo Bernal y bordes tipo zigzag, en (a) ausencia y (b) presencia de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra.

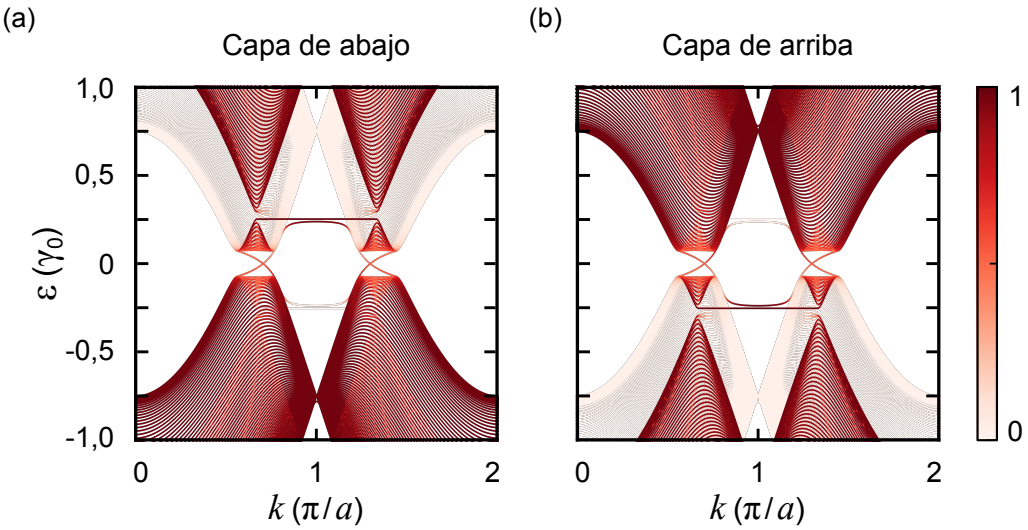


Figura 4.7: Estructura electrónica de una bicapa de grafeno con apilamiento de tipo Bernal y bordes tipo zigzag, en presencia de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra. La escala de color indica el peso de cada estado sobre la capa (a) inferior, y (b) superior.

Determinamos primero las propiedades espectrales de la bicapa de grafeno bajo la acción de un campo eléctrico externo perpendicular a la misma, y con un acoplamiento de tipo Haldane (o spin-órbita intrínseco) o bien irradiada con luz láser. Analizamos de esta forma qué ocurre cuando se conjugan ambas características en un único sistema: la existencia de estados topológicos de borde, y la peculiar estructura electrónica y de acoplamiento entre sitios de la bicapa de grafeno con un voltaje de bias perpendicular.

Los cálculos presentados fueron realizados con códigos propios desarrollados utilizando el módulo Kwant para Python [167]. En el mismo el Hamiltoniano tight-binding del sistema bulk se incorpora en su representación atomística e independiente del tiempo (sección 4.1), tanto para el modelo con términos de Haldane como para la muestra irradiada. Las propiedades espectrales se obtienen a partir del cálculo de autovalores del sistema con simetría de traslación espacial en la dirección x.

4.2.1. Bicapa de grafeno con acoplamiento tipo Haldane

Empecemos analizando la estructura de bandas de la bicapa de grafeno con términos tipo Haldane y bajo un voltaje de bias fuerte ($\Delta = -0{,}5\gamma_0$) aplicado perpendicularmente a la misma. Debido a la presencia de los hoppings a segundos vecinos complejos del modelo de Haldane, cada capa aislada presenta un gap en el bulk con estados tipo Hall quirales que lo atraviesan y que además se propagan a lo largo de los bordes de la muestra (sección 1.2.3) [108]. En ausencia de la interacción intercapa ($\gamma_1 = 0$), el espectro del sistema bicapa de grafeno (figura 4.8 (a)) es equivalente a la suma de las estructuras de bandas de cada capa por separado, es decir, dos copias de la misma estructura desplazadas en Δ en energía.

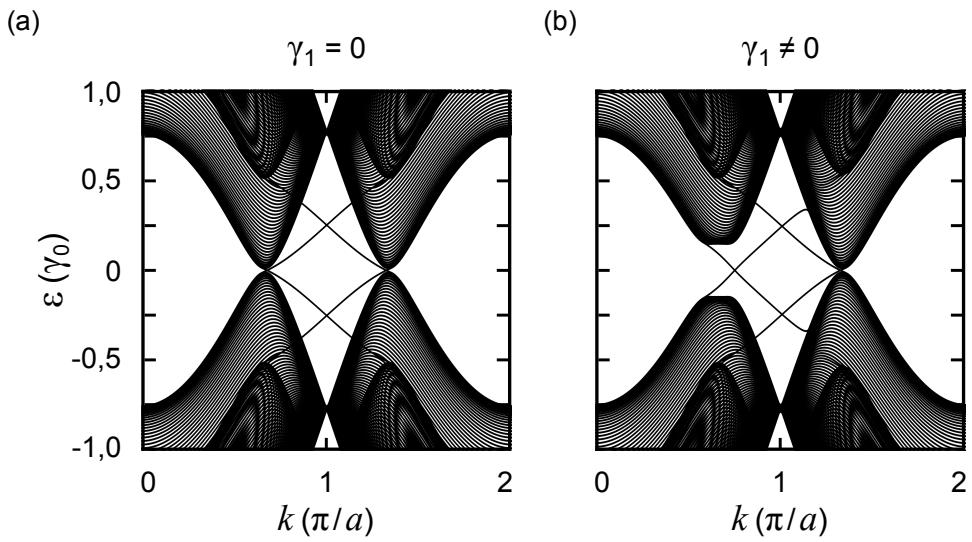


Figura 4.8: Estructura electrónica de una bicapa de grafeno con apilamiento de tipo Bernal y bordes zigzag, en presencia de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra y con términos de acople de tipo Haldane. En (a) la interacción entre las capas es nula, y en (b) $\gamma_1 = 0{,}15\gamma_0$.

Cuando el acople intercapa es no nulo y el sistema se comporta realmente como una bicapa de grafeno, el efecto que se observa a primera vista es la introducción de una asimetría de valle alrededor de energía cero (figura 4.8 (b)). Además, comparando con la figura 4.6 (b), podemos notar la presencia de los estados de borde topológicos propios del modelo. Estos resultados han sido estudiados en detalle previamente en [228]. Sin embargo, probaremos que existe otra asimetría escondida dentro de la estructura de bandas total sin gap de la bicapa de grafeno con términos de acople de tipo Haldane.

Con el objetivo de poner de manifiesto la existencia de esta nueva asimetría, analicemos por separado la estructura electrónica del sistema de acuerdo al peso de cada estado en las distintas capas. La figura 4.9 muestra los espectros coloreados según el peso en la capa inferior (gráficos (a) y (b)) y superior ((c) y (d)) de la bicapa de grafeno donde el acople intercapa es nulo (gráficos (a) y (c)) o no nulo ((b) y (d)). Interesantemente, comparando las estructuras de la izquierda con las de la derecha, se puede observar para el sistema con $\gamma_1 = 0{,}15\gamma_0$ la existencia de un rango de energía donde uno de los dos estados de borde que cruzan el gap de dicha capa se "apaga". Este "apagado" selectivo da como resultado una estructura de bandas no recíproca con una asimetría incorporada entre los estados de borde moviéndose en una dirección y en la opuesta.

Si bien el sistema bicapa de grafeno con términos de acoplamiento de tipo Haldane presenta una estructura electrónica bulk sin gap, encontramos que en la misma coexisten estados de borde. Más aun, aquellos estados en la capa que tiene comportamiento de aislante topológico a la energía de interés (presenta un gap y estados de borde quirales y robustos que lo atraviesan) pueden ser selectivamente

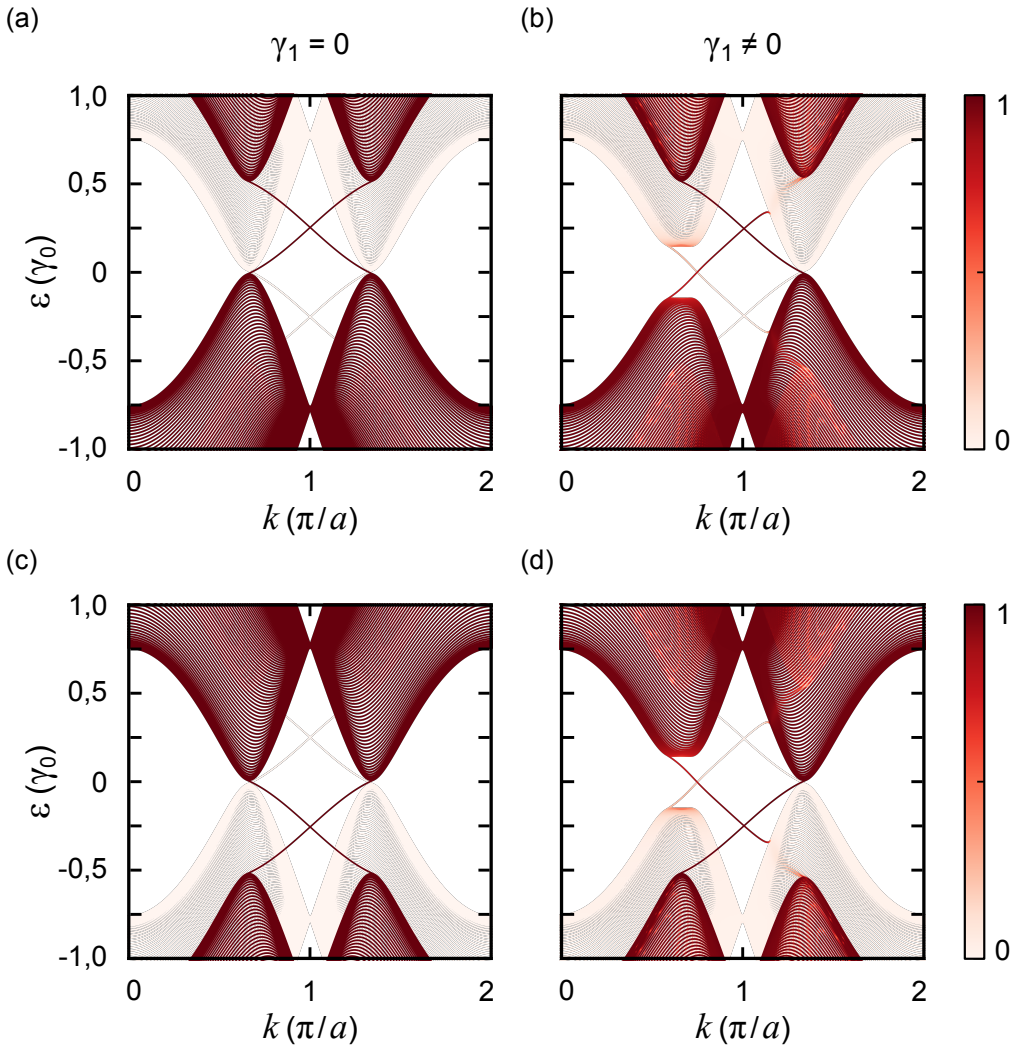


Figura 4.9: Estructura electrónica de una bicapa de grafeno con apilamiento de tipo Bernal y bordes zigzag, en presencia de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra y con términos de acople de tipo Haldane. En (a) y (c) la interacción entre las capas es nula, y en (b) y (d) $\gamma_1 = 0{,}15\gamma_0$. La escala de color indica el peso de cada estado sobre la capa (a) y (b) inferior, y (c) y (d) superior.

destruidos, mientras que los del borde opuesto sobreviven. En la figura 4.10 se muestra la localización de estos estados, donde la escala de color indica el peso de cada uno de los mismos en los sitios ubicados a una distancia de hasta $2{,}5a$ del borde correspondiente. Además de la alta localización en uno u otro borde, se manifiesta la quiralidad de los estados topológicos y la demolición de uno de ellos a la energía correspondiente.

El "apagado" de uno de los estados de borde tiene su origen físico en la hibridización de los mismos con los estados electrónicos del continuo de la capa metálica del sistema (figuras 4.9 (b) y (d)). Debido a la alta densidad de estados en la capa sin gap a la energía de interés, un acoplamiento intercapa pequeño (como puede ser $0{,}15\gamma_0$) es suficiente para producir nuevos autoestados híbridos de la bicapa de grafeno que tienen un peso despreciable en la capa inferior. En un aislante topológico

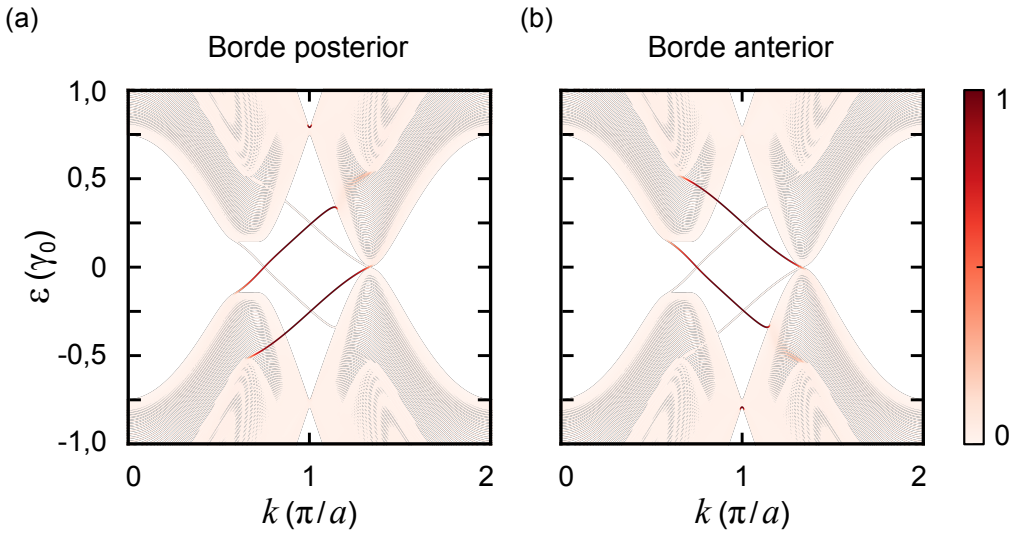


Figura 4.10: Estructura electrónica de una bicapa de grafeno con apilamiento de tipo Bernal y bordes zigzag, en presencia de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra y con términos de acople de tipo Haldane. La escala de color indica el peso de cada estado en una región de ancho $2{,}5a$ desde el borde (a) posterior, y (b) anterior de la capa inferior.

bidimensional esta demolición de un estado está impedida por la correspondencia bulk-frontera, una restricción que se evita en el sistema compuesto por un metal (capa superior, o inferior, de la muestra) sobre un aislante topológico (capa inferior, o superior).

Si bien el razonamiento basado en la hibridización permite explicar la destrucción de un estado de borde, no resulta útil para dilucidar por qué el "apagado" ocurre selectivamente y no actúa de igual manera en todos los estados topológicos del sistema. Para analizar la selectividad del mecanismo, comencemos examinando la estructura electrónica de la bicapa de grafeno con términos de acoplamiento tipo Haldane, codificada según una escala de color que distingue entre las diferentes subredes del sistema (figura 4.11). En primer lugar, es posible notar la fuerte polarización en subred (con un valor del $99\,\%$) de los estados topológicos que cruzan los gaps. Este comportamiento proviene del modelo de Haldane que da origen a dichos estados y está además fomentado por el alto campo eléctrico externo que desfavorece la mezcla entre capas.

El particular apilamiento tipo Bernal de la bicapa de grafeno (figura 4.1) permite diferenciar los sitios A y B dentro de una misma capa. Esto se debe a que el mismo introduce una disparidad entre los sitios acoplados mediante γ_1 (sitios B_1 y A_2) y aquellos que no interactuan con la capa opuesta (A_1 y B_2). Los estados polarizados en estos últimos (A_1 o B_2) estarán entonces más protegidos frente a la hibridización con los estados electrónicos de la otra capa. Por el contrario, los estados topológicos de borde que se encuentren polarizados en la subred B_1 y A_2 interactuarán con el continuo de la otra capa "apagándose" (figuras 4.11 (b) y (e)). La selectividad de la destrucción de los estados de borde topológicos del sistema se vale entonces de la

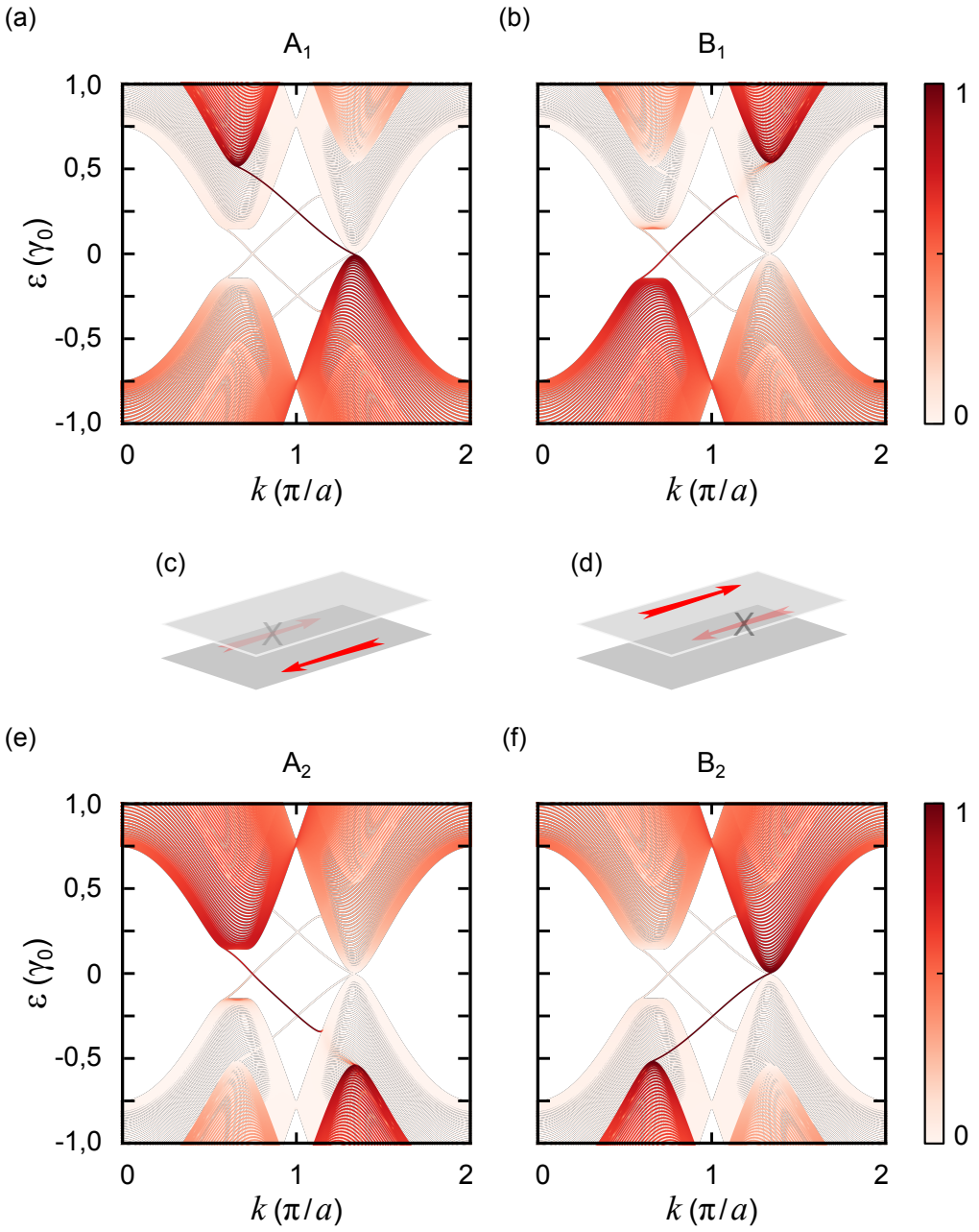


Figura 4.11: Estructura electrónica de una bicapa de grafeno con apilamiento de tipo Bernal y bordes zigzag, en presencia de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra y con términos de acople de tipo Haldane. La escala de color indica el peso de cada estado sobre los sitios (a) A_1, (b) B_1 , (e) A_2 y (f) B_2. En (c) y (d) se representa esquemáticamente la bicapa de grafeno y los estados de borde que son selectivamente "apagados" en la capa inferior y superior, respectivamente.

fuerte polarización en subred de los mismos junto con el peculiar apilamiento tipo Bernal de la bicapa de grafeno.

Por otra parte, el valle (K o K') de la relación de dispersión en el cual la destrucción del estado de borde ocurre depende tanto del voltaje de bias como de los términos de acoplamiento de Haldane. Específicamente si se modifica la polaridad

del campo eléctrico externo o el signo del término γ_H, se intercambia el valle en el cual el estado topológico sobrevive con aquel en el cual se "apaga".

Los resultados mostrados en la presente sección corresponden al caso donde el voltaje de bias entre las capas ($\Delta = -0{,}5\gamma_0$) es de la misma magnitud que el gap del bulk de la bicapa de grafeno con términos de acople de tipo Haldane en ausencia de un campo eléctrico externo. Para este valor de Δ, la estructura electrónica bulk total del sistema no presenta un gap. Sin embargo, podemos ver que las conclusiones obtenidas son independientes de esta característica del sistema.

En la figura 4.12 (a) se presenta la estructura de bandas de la bicapa de grafeno con términos de acoplamiento tipo Haldane y con un voltaje de bias intercapa de $-0{,}3\gamma_0$ (menor en valor absoluto al empleado previamente). Como se puede observar,

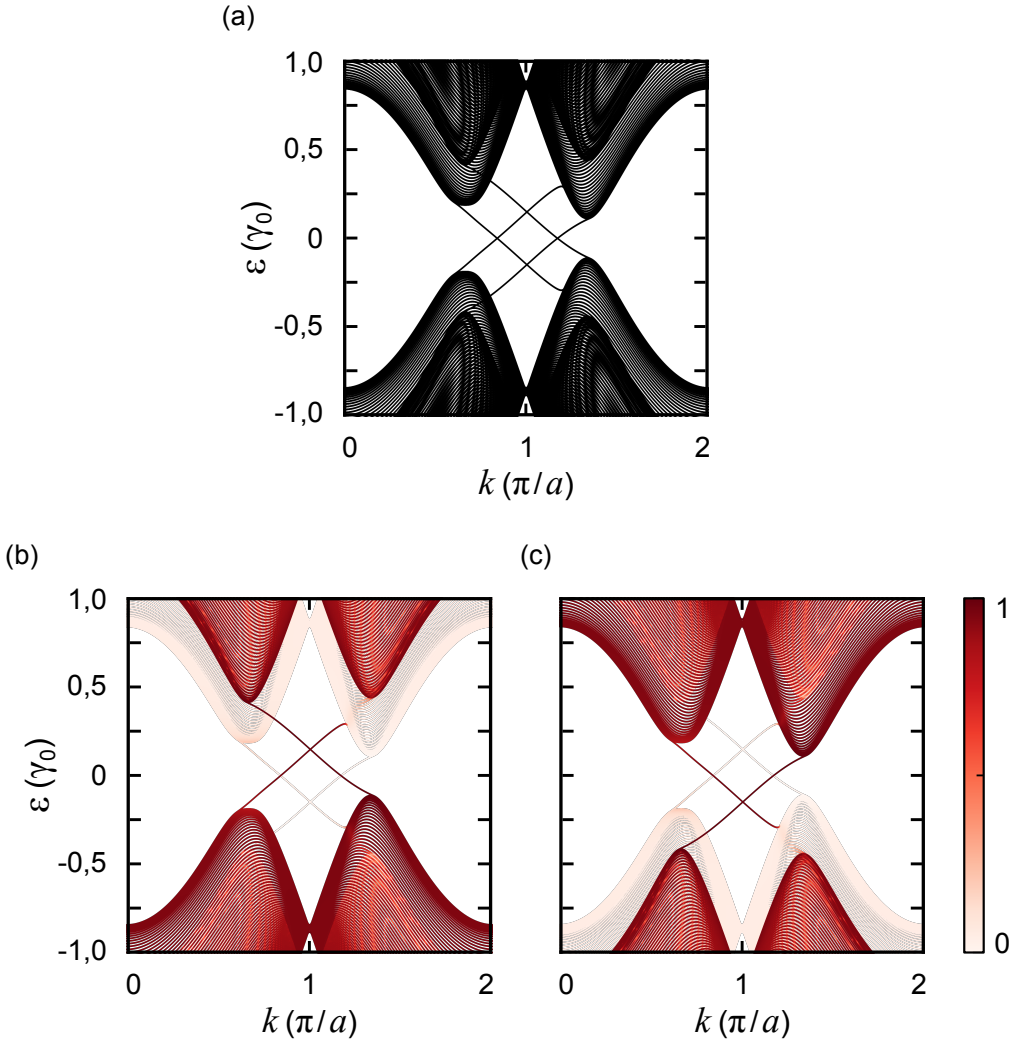


Figura 4.12: Estructura electrónica de una bicapa de grafeno con apilamiento de tipo Bernal y bordes zigzag, en presencia de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra (de valor $\Delta = -0{,}3\gamma_0$) y con términos de acople de tipo Haldane. En (a) se presenta la relación de dispersión completa. La escala de color en (b) y (c) indica el peso de cada estado sobre la capa inferior y superior, respectivamente.

la misma presenta un gap alrededor de energía cero atravesado por los estados de borde quirales. Si coloreamos el espectro en función del peso de los estados electrónicos en la capa inferior (figura 4.12 (b)) o superior (figura 4.12 (c)), podemos notar que existe una región de energía donde se destruye uno de los estados topológicos. Comparando con las figuras 4.9 (b) y (d) se observa que, si bien el "apagado" selectivo de los estados toma lugar sobre un rango de energías menor, el mismo no se modifica sustancialmente.

Bicapa de grafeno con acoplamiento spin-órbita intrínseco

El modelo bicapa de grafeno con términos de acople de tipo Haldane es la base del sistema de bicapa real con acoplamiento spin-órbita intrínseco. El Hamiltoniano tight-binding de este último (ecuación 4.4) corresponde a dos copias idénticas del modelo de Haldane, una por cada spin s_z, pero con fases opuestas en el elemento de matriz de hopping a segundos vecinos. Esta diferencia se refleja en las características de los estados de borde del sistema. Específicamente, en lugar de observarse la existencia de estados quirales, el sistema bicapa de grafeno con términos de acople spin-órbita intrínseco presenta estados helicoidales contra-propagantes y polarizados en spin [111].

La estructura electrónica del modelo con spin se presenta en la figura 4.13 con una escala de color que da cuenta del peso de los estados en la mitad anterior o posterior de la capa inferior. El spin correspondiente a cada estado de borde topológico se indica con una flecha en la figura, evidenciándose la contra-propagación de dichos estados en ambos bordes de la muestra. Al igual que en el modelo con términos tipo Haldane, podemos notar la existencia de una región de energía donde los estados de un borde de la muestra son destruidos.

El "apagado" selectivo de los estados de borde en este caso ocurre sobre ambas proyecciones de spin en un mismo borde de la muestra; mientras que aquellos en el borde opuesto sobreviven (tienen peso neto en la capa correspondiente). Debido al carácter helicoidal, contra-propagante y polarizado en spin de los estados topológicos del sistema bicapa de grafeno con términos de acople spin-órbita intrínsecos, no existe un transporte de carga neto aun cuando los estados de un borde hayan sido destruidos. Sin embargo, los estados sobrevivientes corresponden a diferentes polarizaciones de spin y presentan direcciones de propagación opuesta. Por lo tanto, en este caso, se generará un transporte neto y unidireccional de spin y valle.

Considerando la equivalencia de los resultados analizados previamente y la relación entre los Hamiltonianos del modelo con spin-órbita intrínseco y de Haldane, las conclusiones alcanzadas para el modelo de bicapa de grafeno con términos de interacción de tipo Haldane son válidas también para el sistema con acoplamiento spin-órbita intrínseco bajo ciertas condiciones. Específicamente, los resultados presentados pueden corresponderse a cada proyección de spin por separado, teniendo en consideración el cambio de signo del elemento de matriz de hopping a segundos vecinos complejo.

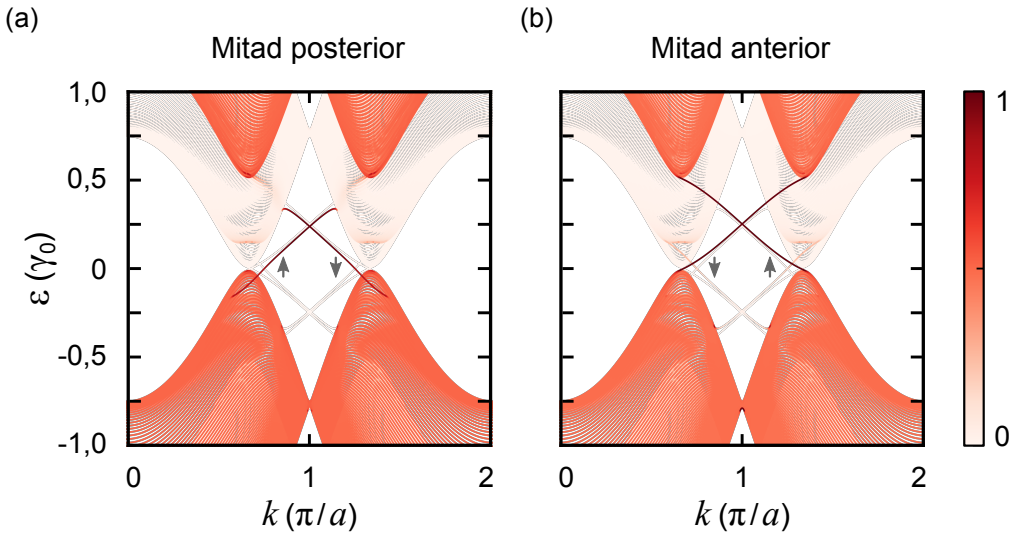


Figura 4.13: Estructura electrónica de una bicapa de grafeno con apilamiento de tipo Bernal y bordes zigzag, en presencia de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra y con términos de acople spin-órbita intrínsecos. La escala de color indica el peso de cada estado en la mitad (a) posterior y (b) anterior de la capa inferior.

4.2.2. Bicapa de grafeno irradiada

Analicemos ahora el caso de una bicapa de grafeno irradiada con luz láser circularmente polarizada y bajo la acción de un voltaje de bias, ambos perpendiculares al plano de la muestra. Sabemos que en una monocapa la radiación electromagnética genera la apertura de un gap en la estructura electrónica a energía cero (además de aquellos a energías $\varepsilon = m\hbar\Omega/2$, $m \in \mathbb{Z}$), donde emergen estados topológicos quirales de borde [116, 117, 119, 133, 224, 225] (dependiendo de los parámetros seleccionados para la luz [144]). En ausencia de la interacción intercapa, la estructura de bandas del modelo bicapa aquí presentado se corresponde a dos copias del espectro perteneciente al sistema monocapa desplazadas en energía (figura 4.14 (a)).

El espectro de la bicapa de grafeno irradiada y con un voltaje de bias, cuando el acoplamiento γ_1 entre ambas capas es no nulo, se presenta en la figura 4.14 (b). En primer lugar podemos notar la asimetría entre los dos valles debido a la ruptura de la simetría de inversión del sistema. Además, comparando con el caso donde $\gamma_1 = 0$ (figura 4.14 (a)), vemos que los estados quirales de borde que atraviesan el gap inducido por la radiación (y que se observan en el sistema monocapa) permanecen sin grandes cambios. Este resultado complementa lo analizado por otros autores para la bicapa de grafeno irradiada en ausencia de un bias, donde también se pone de manifiesto la existencia de estados de borde [126, 226].

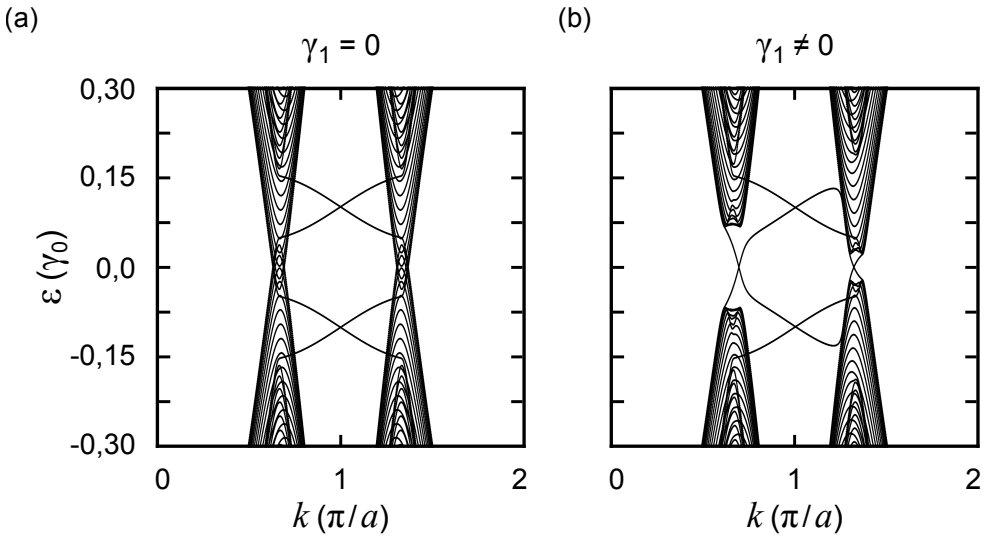


Figura 4.14: Estructura electrónica de una bicapa de grafeno con apilamiento de tipo Bernal y bordes zigzag, en presencia de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra e irradiada con luz láser. En (a) la interacción entre las capas es nula, mientras que en (b) $\gamma_1 = 0{,}15\gamma_0$.

Al igual que para el modelo de Haldane (sección 4.2.1), una característica más atractiva de este sistema se encuentra escondida en la relación de dispersión y se revela cuando analizamos el espectro según el peso en cada capa. La figura 4.15 presenta la estructura de bandas con una escala de color que codifica el peso de los estados en la capa inferior ((a) y (b) para sitios A_1 y B_1, respectivamente) y superior ((e) y (f) que corresponden al peso sobre los sitios A_2 y B_2) de la bicapa de grafeno irradiada. A primera vista, en las figuras 4.15 (b) y (e) se revela la existencia de una región de energía donde los estados topológicos que atraviesan el gap a energías próximas a cero desaparecen. Este "apagado" se debe a la hibridización entre los estados de borde de la capa con un gap (a la energía de interés) con el continuo de la capa metálica, generado por el acoplamiento intercapa (γ_1) de la bicapa de grafeno.

El mecanismo de selectividad de la destrucción de los estados quirales se basa en primer lugar en la polarización de los mismos. En la figura 4.15 podemos distinguir que los estados topológicos localizados en los bordes de la muestra, exhiben una fuerte polarización en subred (mayor al $95\,\%$). Esta polarización se origina en la radiación electromagnética (la cual es responsable de la aparición de dichos estados) y está además favorecida por la presencia del campo eléctrico externo perpendicular.

Debido al apilamiento de tipo Bernal en la bicapa de grafeno (donde los sitios A_2 y B_1 interactúan a través de γ_1, figura 4.1), los estados de borde polarizados en A_2 y B_1 se hibridizan fácilmente con la capa opuesta del sistema. Además, dada la alta densidad de estados en la capa metálica a la energía de interés (figura 4.15), un acoplamiento pequeño como $\gamma_1 = 0{,}1\gamma_0$ es suficiente para "apagar" el estado de borde quiral. Por el contrario, los estados polarizados en los sitios A_1 y B_2 están

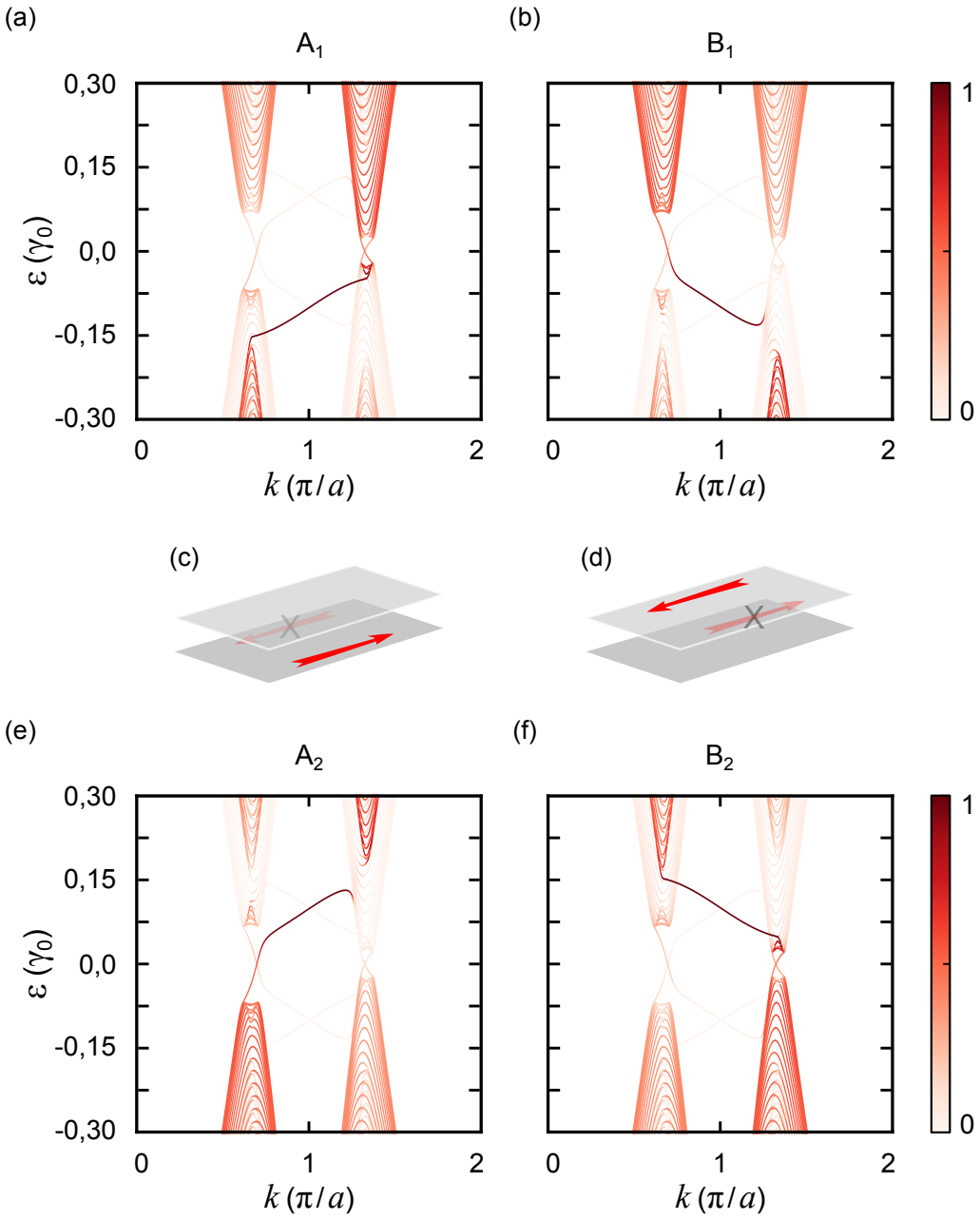


Figura 4.15: Estructura electrónica de una bicapa de grafeno con apilamiento de tipo Bernal y bordes zigzag, en presencia de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra e irradiada con luz láser. La escala de color indica el peso de cada estado sobre los sitios (a) A_1, (b) B_1 , (e) A_2 y (f) B_2. En (c) y (d) se representa esquemáticamente la bicapa de grafeno y los estados de borde que son selectivamente "apagados" en la capa inferior y superior, respectivamente.

protegidos frente a la mezcla por la falta de un acoplamiento directo, por lo que son más robustos y sobreviven (tienen peso neto principalmente en una de las capas).

La estructura electrónica resultante para la bicapa de grafeno irradiada con un voltaje de bias perpendicular a la misma y pesada para cada capa por separado es no-recíproca, exhibiendo una asimetría entre los estados quirales de velocidad

positiva y negativa. Este comportamiento es posible por la interacción entre las capas de la heteroestructura de van der Waals con diferentes propiedades electrónicas (aislante y metal). En un material aislante topológico bidimensional típico, como podría ser una monocapa de grafeno irradiada, la no-reciprocidad de la estructura de bandas está prohibida por la correspondencia bulk-borde.

La radiación electromagnética y el voltaje de bias influyen de manera directa sobre el valor del cuasimomento (k) donde se observa la desaparición del estado de borde en la relación de dispersión. En particular, modificando la polarización de uno de ellos, ya sea transformando z_{rad} en $-z_{\mathrm{rad}}$ o Δ en $-\Delta$, el valle en el cual ocurre el "apagado" selectivo puede ser intercambiado. Por otra parte, la radiación también incide sobre la localización de los estados topológicos en uno u otro borde de la muestra de acuerdo a su sentido de polarización circular (hacia la derecha o hacia la izquierda).

4.3. Transporte electrónico

Los estados electrónicos, presentes a una dada energía, son los responsables de transportar corriente eléctrica en una muestra ya sea a través del bulk (si la banda forma parte de un continuo de energía) o por los bordes (en el caso de estados topológicos quirales). Es por esto que, a partir del análisis de la estructura electrónica, podemos conjeturar sobre la respuesta del transporte para los sistemas bicapa de grafeno analizados (con términos de acople de tipo Haldane o irradiado). Específicamente, la no-reciprocidad de la estrucura de bandas podría verse reflejada en la existencia de una asimetría en el transporte de carga, valle o spin. El caso límite es la obtención de transporte unidireccional donde la corriente puede fluir entre dos electrodos en una única dirección.

La bicapa de grafeno bajo la acción de un voltaje de bias externo presenta la simetría de inversión rota. Además, tanto los términos de acople a segundos vecinos complejos del modelo de Haldane (con una fase determinada) como la irradiación de la muestra con luz láser circularmente polarizada, rompen la simetría de reversión temporal. De esta manera, la simetría izquierda-derecha del sistema bicapa de grafeno perturbado externamente está quebrada. Por lo tanto es factible a priori que los modelos estudiados exhiban transporte electrónico asimétrico y hasta unidireccional.

Sin embargo, la ruptura de la simetría izquierda-derecha no puede ser aprovechada conectando únicamente dos cables a una de las capas de la muestra (en este caso la inferior). Esto se debe a la unitariedad de la matriz de scattering, que por ser 2×2 impone que la transmisión desde el cable de la izquierda (L) al de la derecha (R) sea igual a la transmisión en la dirección opuesta. Este condicionamiento puede relajarse incorporándose un tercer cable de grafeno monocapa unido por la zona central de la muestra a la capa superior (figura 4.16), un "truco" inspirado en la física del bombeo cuántico. La conservación de la probabilidad de corriente (y la unitarie-

dad) es obligatoria ahora para la nueva matriz de scattering 3×3. De esta manera la matriz de scattering 2×2 efectiva para los electrodos "activos" (aquellos unidos a la capa inferior por izquierda y por derecha) puede ser asimétrica, permitiendo al mismo tiempo el control independiente de las ocupaciones de los cables y la explotación de las propiedades de no-reciprocidad de la estructura electrónica.

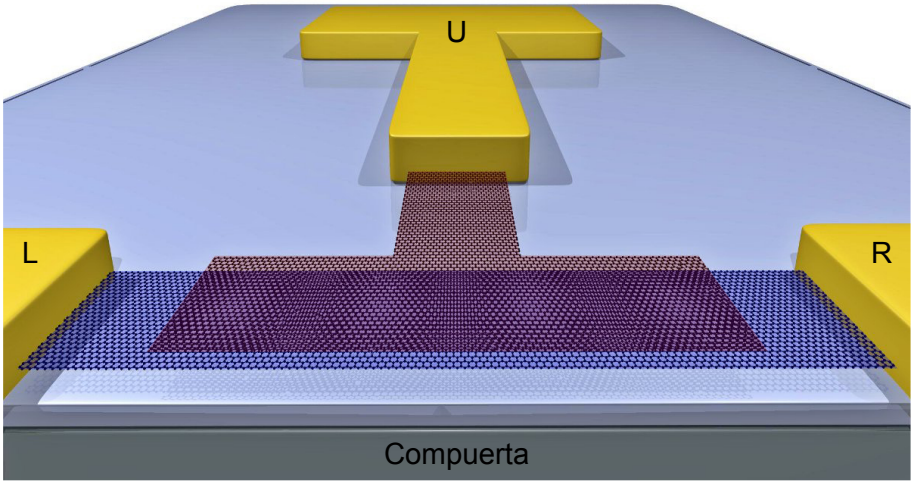


Figura 4.16: Esquema del sistema de tres terminales formado por una muestra bicapa de grafeno. Los cables L y R se unen a la capa inferior y el U a la capa superior de la muestra.

A continuación analizamos las propiedades de transporte de carga, valle o spin de los sistemas bicapa de grafeno con un voltaje de bias perpendicular, y términos de acople de tipo Haldane o irradiado. Las mismas fueron calculadas a partir de la matriz de scattering de dichos sistemas. Para ello se elaboraron códigos basados en el módulo Kwant para Python [167] donde se incorporó el Hamiltoniano tight-binding en su representación atomística e independiente del tiempo.

Bicapa de grafeno con acoplamiento tipo Haldane

Las transmisiones entre los cables L y R unidos a la capa inferior de la muestra bicapa de grafeno con términos de acople de tipo Haldane y bajo la acción de un campo eléctrico externo se presentan en la figura 4.17. En la misma se observa una región de energía donde el transporte exhibe una asimetría direccional ($T_{L\to R} \neq T_{R\to L}$). De hecho, en el rango donde los estados de un borde son selectivamente apagados (aproximadamente entre $0{,}35\gamma_0$ y $0{,}51\gamma_0$), el transporte de carga es casi perfectamente no-recíproco y unidireccional.

En el dispositivo geométrico planteado (figura 4.16), el tercer electrodo unido a la capa superior (U) se utiliza para desviar las reflexiones indeseadas. De hecho, aquellos modos entrantes que coinciden con los estados de borde apagados no son retrodispersados sino que son desviados hacia el cable superior (debido a la conservación de corriente tampoco pueden simplemente desaparecer). Cuando miramos el sistema como un todo, observamos que en el rango de energía donde

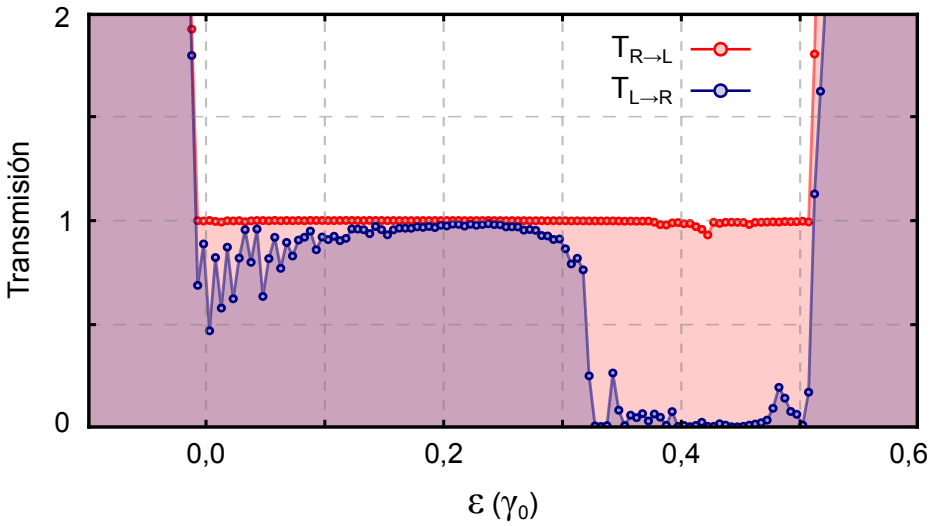


Figura 4.17: Transmisiones entre los cables L y R en función de la energía electrónica para el sistema formado por una bicapa de grafeno con apilamiento de tipo Bernal y bordes zigzag, en presencia de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra y con términos de acople de tipo Haldane.

los estados de borde son selectivamente destruidos, la carga fluye de R a L a U y de nuevo a R pero no en la dirección opuesta.

Las conclusiones obtenidas a partir de la gráfica de las transmisiones se pueden verificar mediante el cálculo explícito de las corrientes eléctricas. En este caso, la corriente que fluye a través del cable R queda definida por:

$$\mathcal{I}_R = \frac{e}{h}\int \sum_{\alpha\neq R}[T_{\alpha\to R}(\varepsilon)f_\alpha(\varepsilon) - T_{R\to\alpha}(\varepsilon)f_R(\varepsilon)]d\varepsilon \tag{4.17}$$

donde $\alpha = L, U$ y $f_\alpha(\varepsilon) = (\exp[(\varepsilon-\mu_\alpha)/k_BT]+1)^{-1}$ es la distribución de Fermi-Dirac en el cable α. En el límite de baja temperatura, esta distribución se convierte en una función escalón de Heaviside y obtenemos $\mathcal{I}_R = \frac{e}{h}\sum_{\alpha\neq R}[T_{\alpha\to R}(\varepsilon)\mu_\alpha(\varepsilon) - T_{R\to\alpha}(\varepsilon)\mu_R(\varepsilon)]$. Una expresión equivalente se puede establecer para el cable de la izquierda.

Las transmisiones a través del sistema bicapa de grafeno verifican la regla de la suma $\sum_{\alpha\neq R}T_{\alpha\to R}(\varepsilon) = \sum_{\alpha\neq R}T_{R\to\alpha}(\varepsilon)$. Es por esto que, aun cuando la matriz de scattering es no-recíproca (debido a la ruptura de las simetrías de inversión y de reversión temporal), si todas las ocupaciones μ de los cables son iguales el integrando de la ecuación 4.17 es idénticamente cero. Para obtener una corriente direccional es necesario entonces que el potencial químico en el tercer electrodo (μ_U) sea diferente del de los cables en la otra capa (μ_0), es decir, $\mu_U = \mu_0 - \delta\mu$.

En la figura 4.18 se presentan las corrientes $\mathcal{I}_R$ e $\mathcal{I}_L$ para el sistema bicapa de grafeno con un potencial de bias perpendicular y acoplamientos de tipo Haldane, graficadas como función de las energías de Fermi en los cables R y L ($\mu_R = \mu_L = \varepsilon_0^F$) y con $\mu_U = 0{,}357\gamma_0$. El rango de energía mostrado corresponde a aquel donde los estados de un dado borde son selectivamente apagados, generando una asimetría

direccional en las transmisiones (figura 4.17). Podemos notar en la figura 4.18 que se genera una corirente neta $\mathcal{I}_R(\varepsilon) = -[e/h]\,\delta\mu(\varepsilon)$ desde el cable de la derecha hacia el de la izquierda. Interesantemente, esto ocurre aun sin una diferencia de voltaje aplicada entre los electrodos fuente y sumidero ($\mu_L - \mu_R = 0$), por lo que se puede interpretar como un efecto de bombeo operando sin potenciales dependientes del tiempo.

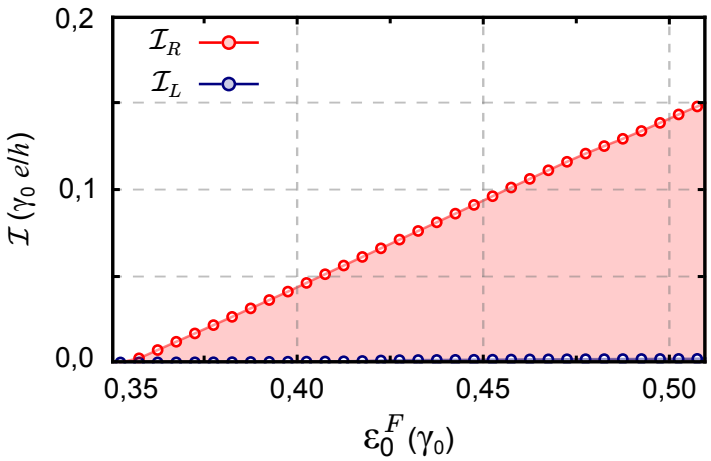


Figura 4.18: Corrientes eléctricas en los cables L y R en función de la energía electrónica para el sistema formado por una bicapa de grafeno con apilamiento de tipo Bernal y bordes zigzag, en presencia de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra y con términos de acople de tipo Haldane.

Resultados análogos se obtienen, por otra parte, para el sistema bicapa de grafeno con términos de acople spin-órbita intrínsecos (una representación real del modelo de Haldane). En el caso de un dispositivo basado en esta muestra y con un arreglo geométrico como el de la figura 4.16, se obtiene una corriente neta de spin y valle, y nula de carga. Esto se debe a que los estados de borde del sistema son helicoidales y contra-propagantes (en un mismo borde tenemos estados con velocidades y spines opuestos), tal como se observó en la estructura electrónica (sección 4.2.1). Por lo tanto, este dispositivo bombeará spin y valle desde el cable de la izquierda al de la derecha (y viceversa para la otra componente). En contraste con una propuesta previa para la inyección de spin donde se utilizaron estados de borde en una fase no topológica [232], en el sistema estudiado en el presente capítulo (bicapa de grafeno con acople spin-órbita intrínseco) el transporte aprovecha la robustez brindada por la fase topológica subyacente en la capa inferior de la heteroestructura de van der Waals.

Bicapa de grafeno irradiada

Veamos ahora el caso de la bicapa de grafeno irradiada con luz láser circularmente polarizada y bajo la acción de un bias perpendicular a la misma. En la figura 4.19 se presentan las transmisiones de izquierda a derecha (y viceversa) para este sistema. El rango de energía seleccionado corresponde a aquel donde la capa inferior (a

la cual están unidas los cables L y R) presenta un gap en su estructura de bandas (figura 4.15). Por otra parte, asumimos que la termalización del sistema ocurre en los cables, es decir, que los electrones que ingresan al sistema sin excitar (a través de la réplica de Floquet con $n = 0$ del cable L o R) e interactúan con la radiación láser dentro del mismo, pueden dejar el sistema en estados excitados presentes a dicha energía (saliendo por cualquier réplica del cable R o L). Esto implica que en el espacio de Floquet debemos sumar las contribuciones a la transmisión a una dada energía de todas las réplicas.

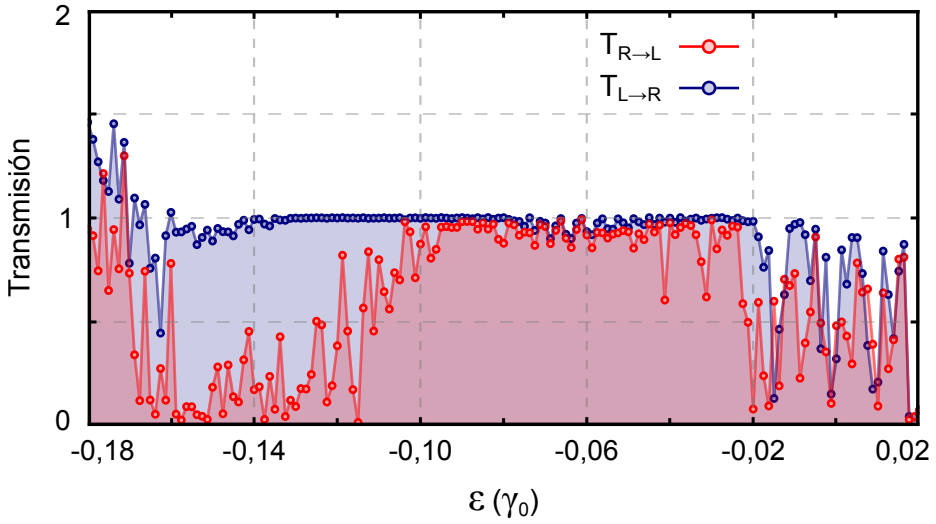


Figura 4.19: Transmisiones entre los cables L y R en función de la energía electrónica para el sistema formado por una bicapa de grafeno con apilamiento de tipo Bernal y bordes zigzag, en presencia de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra e irradiada con luz láser.

En la figura 4.19 podemos notar en primer lugar la existencia de una asimetría direccional en las transmisiones (la transmisión electrónica de izquierda a derecha es distinta a la transmisión en el sentido opuesto). Esta asimetría ocurre en la región de energía donde los estados de un dado borde son selectivamente “apagados”, reflejando la no-reciprocidad de la estructura electrónica del sistema. Al igual que para el modelo de Haldane desarrollado previamente, los modos entrantes que coinciden en energía y sentido de propagación con aquellos estados destruidos son desviados hacia el cable unido a la capa superior del dispositivo (figura 4.16). De esta manera, la carga en el sistema fluye de L a R y de ahí a U respetando la conservación de la probabilidad de corriente.

Comparando los resultados obtenidos para el modelo de Haldane con aquellos de la bicapa irradiada (figuras 4.17 y 4.19) podemos notar que difieren en la dirección de propagación de los estados destruidos. Ésta queda determinada por los parámetros empleados en las simulaciones computacionales, como son la polarización del voltaje de bias, y el sentido de la fase del hopping complejo en el modelo de Haldane o de la polarización de la luz láser en la bicapa de grafeno irradiada. Otra diferencia es que el sistema iluminado (figura 4.19) presenta mayor ruido en las transmisiones. Una

primera causa plausible para este comportamiento surge de la estructura electrónica, según la cual el rango de energía donde el estado quiral es demolido es pequeño (aproximadamente $0{,}07\gamma_0$), y aun cuando está predominantemente localizado en la capa metálica superior, su peso es no nulo en la inferior (figura 4.15 (b)).

Sin embargo debemos considerar también otros factores que introducen fluctuaciones en los cálculos de las transmisiones electrónicas de la bicapa de grafeno irradiada, como son el apagado progresivo de la luz láser y del voltaje de bias (ambos presentes en los experimentos). En el modelo teórico de Haldane, por el contrario, tanto el campo eléctrico externo como los términos de acople complejos a segundos vecinos se encuentran presentes en los electrodos. Por otra parte, el cambio abrupto de la muestra bicapa de grafeno a los cables monocapa, y la existencia de un pseudospin en los mismos (producto de la particular estructura electrónica del grafeno monocapa), son elementos que también pueden incorporar ruido en las propiedades de transporte pero que, en este caso, están presentes en ambos sistemas estudiados.

4.3.1. Aislador electrónico

La asimetría presente en las transmisiones de los sistemas bicapa de grafeno con un voltaje de bias y con términos de acople de tipo Haldane o irradiado con luz láser rememora aquella propia de los aisladores en fotónica [227]. Estos dispositivos permiten que la luz pase en una dirección pero la bloquea, o redirige hacia un tercer puerto o terminal, en la dirección opuesta. Es por esto que son de gran utilidad en situaciones en las cuales las reflexiones son indeseadas, como, por ejemplo, cuando pueden revelar información a un observador que intercepta la señal. Más aun, los aisladores pueden disminuir (y hasta eliminar) otros efectos perjudiciales para la transmisión de una señal como son las interferencias espurias y la dirección involuntaria.

Este efecto de tipo aislador es también deseable en el contexto de la electrónica donde, según nuestro conocimiento, aún no existe un dispositivo que cumpla dicho rol. Esto se debe en primer lugar a que en los dispositivos electrónicos típicos la matriz de scattering debe ser unitaria y por ende simétrica. Teóricamente, un aislador óptico requiere de al menos dos terminales (cada una con un modo) conectadas al dispositivo de manera tal que la transmisión pueda ocurrir desde una de las terminales hacia la otra pero no en la dirección opuesta. Es decir que la matriz de scattering correspondiente debe ser asimétrica y particularmente, para el caso de un aislador ideal con dos terminales, debería ser $S = \left(\begin{smallmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{smallmatrix}\right)$.

En la sección previa determinamos que, mediante la incorporación de un tercer cable auxiliar, la matriz de scattering efectiva para los sistemas modelo de bicapa de grafeno perturbados con dos electrodos activos es de hecho asimétrica. Más aun, la estructura electrónica propia de estos sistemas es no-recíproca, la cual se ve reflejada en las propiedades de transporte donde la carga fluye en una dirección pero

no en la opuesta (al menos para un subconjunto de modos electrónicos). Es por esto que denominamos a los modelos a dos terminales estudiados en el presente capítulo como aisladores electrónicos. Si en cambio consideramos al sistema completo, donde la carga fluye del cable localizado a la derecha hacia el de la izquieda y de ahí hacia el de la capa superior (o viceversa), el dispositivo se conoce como circulador [233].

Previamente, diferentes autores han propuesto sistemas que presentan transporte de carga direccional obtenidos utilizando campos externos dependientes del tiempo. El caso más típico y emblemático es el del bombeo cuántico, donde se emplean potenciales dependientes del tiempo para dirigir el transporte. De esta forma se pueden obtener corrientes eléctricas continuas aun a una diferencia de potencial nula entre los electrodos fuente y sumidero, o en contra de un voltaje de bias externo [234-239]. Sin embargo, los modelos basados en una bicapa de grafeno estudiados en el presente capítulo difieren de los anteriores principalmente en dos aspectos. En primer lugar la componente reflexiva de la matriz de scattering de una bomba cuántica es no nula, y segundo, en los sistemas bicapa de grafeno aquí analizados la direccionalidad está construida dentro de la estructura electrónica.

Por otra parte, un trabajo previo probó la inducción de no-reciprocidad óptica (y la generación de un aislador óptico) a partir de la aplicación de un campo eléctrico externo dependiente del tiempo [240]. Este resultado corresponde exactamente al caso inverso de uno de los sistemas propuestos en el presente capítulo, donde se genera una asimetría en las propiedades eléctricas a través de la iluminación de la muestra. Cuando la bicapa de grafeno es irradiada con luz láser circularmente polarizada, obtenemos un aislador electrónico de Floquet casi perfecto.

4.3.2. Desorden y rugosidad

Para ser de utilidad en aplicaciones tecnológicas, un buen aislador electrónico debe ser robusto frente a desorden del sistema. Esto implica que sus propiedades de transporte no deben verse modificadas por detalles experimentales como la terminación de los bordes, la rugosidad de los mismos, el orden de apilamiento o la presencia de defectos. De esta manera, la unidireccionalidad del transporte electrónico se puede conservar, o incluso mejorarse, aun cuando la muestra no sea perfecta.

Ahora bien, en los sistemas bicapa de grafeno analizados, la no-reciprocidad de las transmisiones se origina por el “apagado” selectivo de los estados de un borde. El mecanismo de selectividad está basado en la polarización en subred de los estados quirales de la capa topológica de la muestra (sección 4.2). Por lo tanto, una pequeña alteración del sistema físico podría generar la ruptura de los estados de borde que transportan corriente (aquellos que sobreviven al “apagado”) y por ende de la direccionalidad del transporte electrónico. Sería interesante entonces desarrollar una estrategia para que: (i) el agregado de desorden y rugosidad en los bordes de la muestra favorezca el “apagado” selectivo de los estados de un borde, y (ii) los estados que sobreviven mantengan la robustez dada por el carácter topológico de la

monocapa aislada de grafeno con términos de acople de tipo Haldane o irradiada con luz láser circularmente polarizada.

Con el objetivo de mejorar el carácter aislador de los modelos estudiados ante el desorden, diseñamos un dispositivo levemente diferente. Específicamente, "destapamos" el borde de la capa inferior de la muestra que presenta los estados que transportan carga, de manera tal que la mitad de la misma es una bicapa de grafeno y la otra mitad es monocapa (figura 4.20). Este nuevo arreglo geométrico aprovecha tanto la robustez de los estados de borde topológicos de la monocapa de grafeno perturbada [108, 110, 117, 119], como la no-reciprocidad de la estructura electrónica de los sistemas bicapa de grafeno presentados.

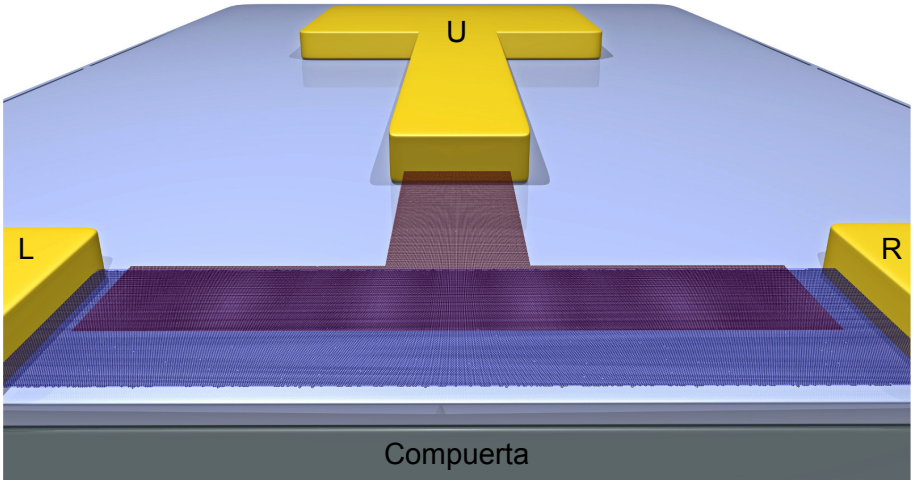


Figura 4.20: Esquema del sistema de tres terminales formado por una muestra bicapa de grafeno semicubierta (una mitad es bicapa y la otra es monocapa) con rugosidad en los bordes de la capa inferior. Los cables L y R se unen a la capa inferior y el U a la capa superior de la muestra.

Los estados de borde quirales que están localizados en el borde de la muestra en la región monocapa del dispositivo (y que son aquellos que en el sistema bicapa completo sobrevivían al "apagado") se encuentran desacoplados del continuo de la capa superior. De esta manera, los mismos recuperan la robustez frente al desorden y rugosidad de la muestra. Por la otra parte, para aquellos estados ubicados en el borde opuesto de la cinta se mantiene el entorno de la bicapa de grafeno y, particularmente, la interacción con la capa metálica superior. Por lo tanto se conserva de manera efectiva el "apagado" de los mismos y la transmisión en dicho borde es aproximadamente nula independientemente de los detalles específicos de la muestra (terminación, orden de apilamiento, características de la red de la capa superior, rugosidad y desorden). Este nuevo arreglo geométrico del dispositivo representa entonces un segundo mecanismo de selectividad del apagado de los estados de borde quirales.

Bicapa de grafeno con acoplamiento tipo Haldane

Comencemos estudiando las propiedades de transporte de la bicapa de grafeno con un voltaje de bias perpendicular y términos de acople de tipo Haldane, donde el arreglo geométrico del dispositivo corresponde al presentado en la figura 4.20. Las transmisiones entre los cables unidos a la capa inferior por la izquierda y la derecha del sistema en ausencia de desorden y rugosidad se muestran en la figura 4.21. A partir de la misma podemos notar que existe un rango de energía donde la transmisión es nula en una dada dirección (mientras que en la contraria es casi perfectamente uno). Este intervalo coincide con aquel donde el estado de borde es selectivamente "apagado" en la estructura electrónica. Además, comparando con la respuesta obtenida para el dispositivo equivalente formado por una bicapa de grafeno completa (figura 4.17), se observa claramente que el nuevo arreglo geométrico no modifica de manera sustancial la asimetría direccional del transporte.

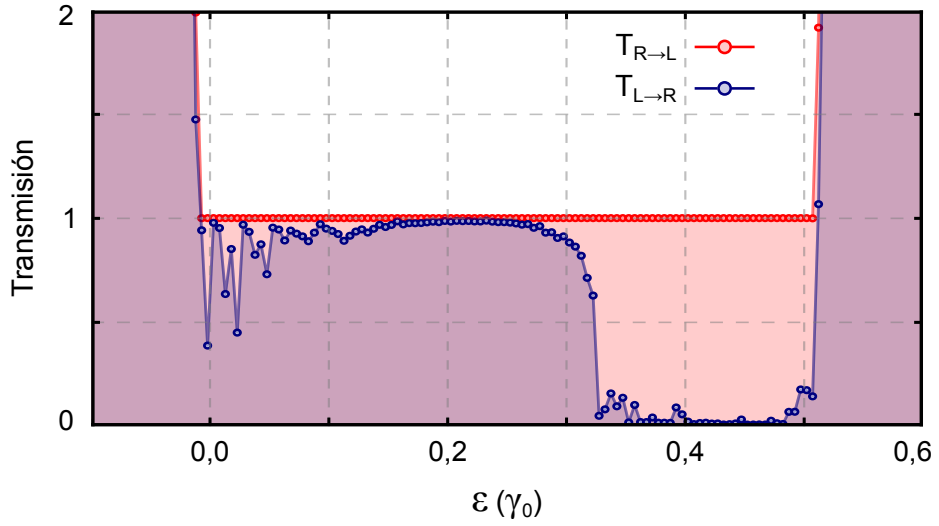


Figura 4.21: Transmisiones entre los cables L y R en función de la energía electrónica para el sistema formado por una bicapa de grafeno semicubierta con apilamiento de tipo Bernal y bordes zigzag, en presencia de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra y con términos de acople de tipo Haldane.

Analicemos ahora qué sucede cuando se incorpora desorden (vacancias) y rugosidad a la muestra. La figura 4.22 ilustra el caso del sistema bicapa de grafeno perturbado con 0,1 $\%$ de vacancias distribuidas al azar en toda la capa superior y rugosidad en los bordes de la capa inferior. La rugosidad se introduce en la muestra a partir de la elección aleatoria de un sitio en cada línea de átomos perpendicular a la dirección del transporte (a una distancia máxima de $3a$ del borde), y la posterior eliminación de los sitios restantes hacia el borde y de los enlaces colgantes. De esta manera se obtiene una cinta de grafeno con terminación arbitraria en los bordes (sección 1.1.3).

En comparación con el caso prístino podemos notar en la figura 4.22 que los estados que transportan carga permanecen robustos frente al desorden (la trans-

misión de derecha a izquierda se mantiene unitaria). Sin embargo, lo que resulta más interesante, es que el transporte en la dirección opuesta está suprimido en todo el intervalo de energía que corresponde al gap de la capa inferior de grafeno (figura 4.9 (b)). Esto implica que el sistema no sólo es robusto frente al desorden, sino que mejora su respuesta como aislador electrónico.

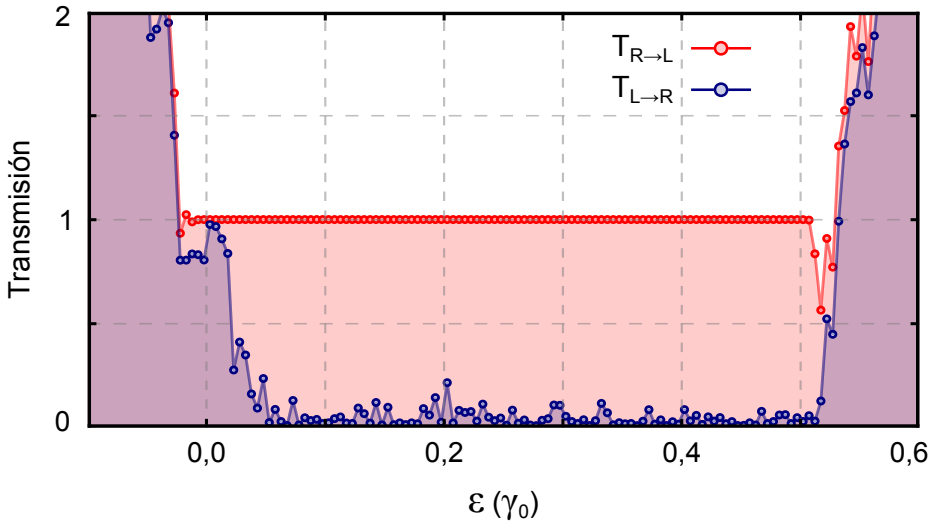


Figura 4.22: Transmisiones entre los cables L y R en función de la energía electrónica para el sistema formado por una bicapa de grafeno semicubierta con apilamiento de tipo Bernal y bordes zigzag, en presencia de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra y con términos de acople de tipo Haldane. La muestra presenta además rugosidad en los bordes de la capa inferior y 0,1 $\%$ de vacancias distribuidas al azar.

Sabemos que, por la correspondencia bulk-borde, cuando dos sistemas aislantes con diferente topología entran en contacto pueden generarse nuevos estados en la frontera entre ambos (sección 1.2.2). Es natural entonces cuestionarnos si nuevos estados de borde se formarán en la interfaz monocapa-bicapa de grafeno creada en el dispositivo (figura 4.20). Sin embargo, y tal como verificamos numéricamente, este no es el caso ya que el alto valor del voltaje de bias externo permite que cada capa mantenga sus propiedades en un gran porcentaje. Además como la capa superior es metálica a la energía de interés, dicha correspondencia no puede ser aplicada.

En la construcción del nuevo arreglo geométrico del dispositivo, definimos que el borde que permanece cubierto (es decir el que se mantiene como bicapa de grafeno) es aquel donde el estado quiral es selectivamente “apagado”. De esta manera nos aseguramos que la estructura electrónica y las propiedades de transporte resultantes sean no-recíprocas. No obstante, experimentalmente no es posible determinar a priori cuál es cada borde y recién después destapar uno de ellos. Es por esto que sería conveniente que el carácter aislador del sistema sea independiente del borde cubierto.

En la figura 4.23 se presentan las transmisiones para el caso donde la mitad de la muestra cubierta es la opuesta a la de la figura 4.21. En este caso el estado de borde

a “apagar” está polarizado en la subred A_1 (figura 4.11 (a)), aquella que no tiene un acoplamiento directo con la capa superior. Es por esto que, en ausencia de desorden y rugosidad, la transmisión de derecha a izquierda (la que corresponde en este caso al borde cubierto) se ve levemente suprimida pero no es estrictamente (o próxima a) cero. De hecho, el intervalo de energía en el cual la transmisión disminuye es menor a aquel donde el estado de borde es selectivamente destruido en la estructura de bandas (figura 4.21). Estos resultados dan cuenta de que el transporte electrónico difiere en el nuevo arreglo geométrico según cuál sea el borde cubierto.

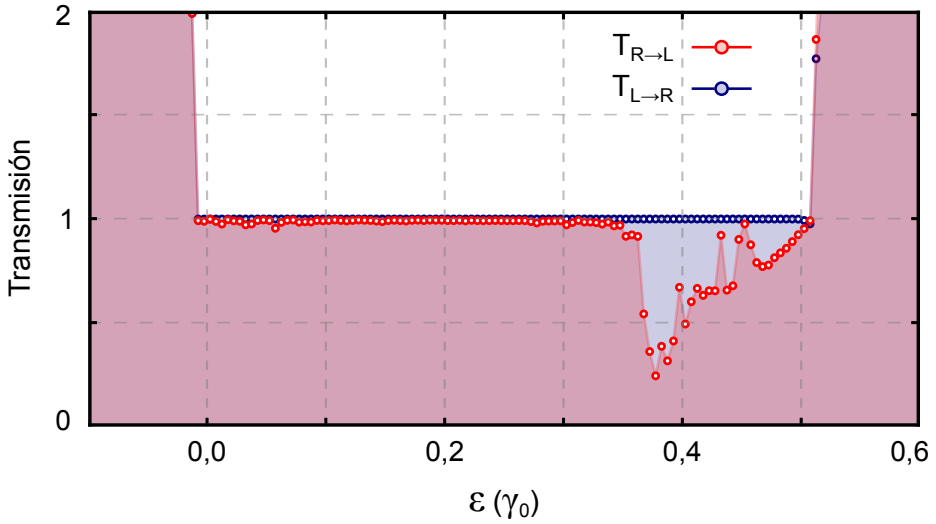


Figura 4.23: Transmisiones entre los cables L y R en función de la energía electrónica para el sistema formado por una bicapa de grafeno semicubierta con apilamiento de tipo Bernal y bordes zigzag, en presencia de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra y con términos de acople de tipo Haldane. El borde de la capa inferior cubierto corresponde al opuesto del presentado en las figuras 4.20 y 4.21.

Si se incorporan imperfecciones a la red, la respuesta cambia radicalmente. En la figura 4.24 se muestran las propiedades de transporte para el sistema correspondiente a la figura 4.23 con 0,1 $\%$ de vacancias distribuidas al azar y rugosidad en los bordes. A primera vista es notoria la diferencia en las transmisiones entre las muestras sin y con desorden. Al incorporar rugosidad y vacancias, el transporte se vuelve netamente asimétrico y unidireccional. Además esto ocurre en todo el intervalo del gap de la capa inferior de grafeno, al igual que para el sistema con el borde opuesto cubierto (figura 4.22).

El agregado de desorden y rugosidad al sistema de grafeno semicubierto (con un arreglo geométrico como el de la figura 4.20) tiene al menos dos incidencias significativas. En primer lugar, torna indistinto el borde de la muestra que sea monocapa y aquel que se mantiene como bicapa de grafeno. Por otra parte, mejora el transporte unidireccional en comparación con el sistema prístino, ampliando el intervalo de energía donde se observa la asimetría. Este comportamiento es diferente de ser

meramente resiliente al desorden (como es el caso de los estados topológicos) y ocurre porque mientras los estados de borde que transportan carga permanecen robustos, la demolición de los otros se ve acrecentada.

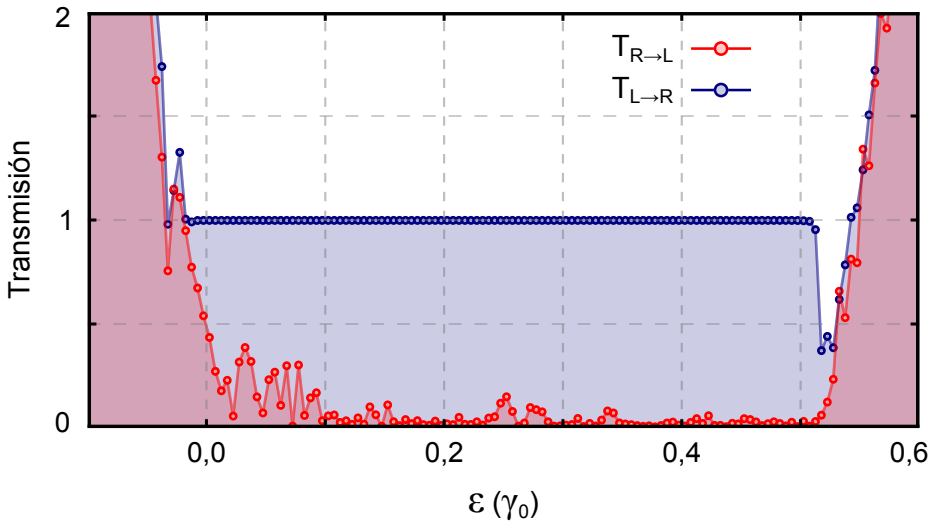


Figura 4.24: Transmisiones entre los cables L y R en función de la energía electrónica para el sistema formado por una bicapa de grafeno semicubierta con apilamiento de tipo Bernal y bordes zigzag, en presencia de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra y con términos de acople de tipo Haldane. La muestra presenta además rugosidad en los bordes de la capa inferior y 0,1 $\%$ de vacancias distribuidas al azar. El borde de la capa inferior cubierto corresponde al opuesto del presentado en las figuras 4.20 y 4.22.

Previamente determinamos que el "apagado" selectivo de los estados de uno de los bordes del sistema bicapa de grafeno estudiado puede originarse en la polarización en subred de los mismos (sección 4.2). Sin embargo, el transporte electrónico es en este caso frágil frente a perturbaciones como pueden ser la incorporación de vacancias, la rugosidad o un cambio del orden de apilamiento de las capas. En cambio, este nuevo mecanismo de demolición selectiva de los estados de borde del sistema, basado en el arreglo geométrico del dispositivo, puede tornarse aun más efectivo frente al desorden del sistema y por ende es anti-frágil [241].

Bicapa de grafeno irradiada

Un análisis equivalente al anterior puede realizarse para el caso de la bicapa de grafeno bajo la acción de un campo eléctrico externo e irradiada con luz láser circularmente polarizada. La figura 4.25 presenta las transmisiones entre los cables unidos a la capa inferior a la izquierda y a la derecha del dispositivo semicubierto (figura 4.20) en ausencia de imperfecciones en la red. Como podemos ver existe un intervalo de energía donde el transporte electrónico es asimétrico, al igual que en la figura 4.19 para el caso del sistema bicapa completo. En este rango de energía es donde los estados de borde son selectivamente "apagados" en la estructura electrónica (figura 4.15).

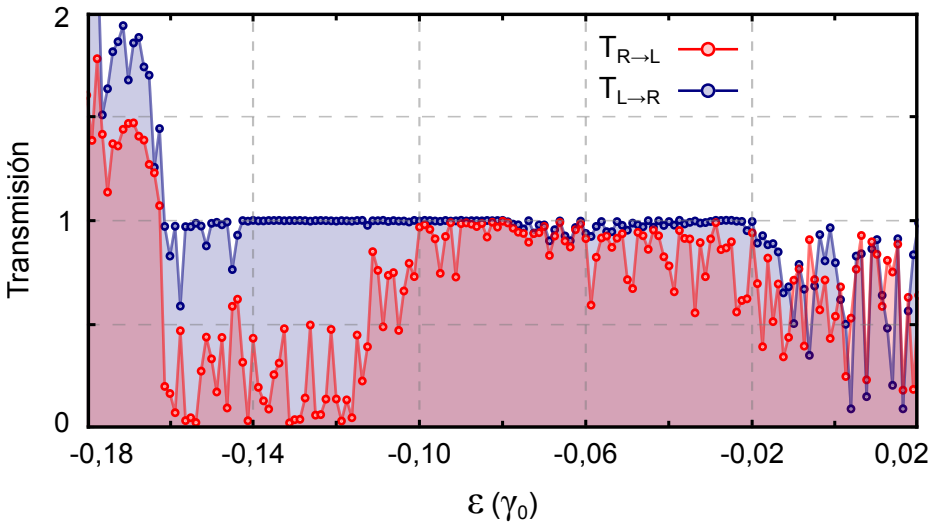


Figura 4.25: Transmisiones entre los cables L y R en función de la energía electrónica para el sistema formado por una bicapa de grafeno semicubierta con apilamiento de tipo Bernal y bordes zigzag, en presencia de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra e irradiada con luz láser.

En la figura 4.26 se muestran las propiedades de transporte para el caso donde el sistema presenta rugosidad en los bordes y vacancias al 0,1 %. Podemos notar que, en presencia de desorden, la asimetría direccional no sólo está preservada sino que incluso está potenciada. En particular, el rango de energía donde el transporte es unidireccional es ahora igual al gap de la estructura de bandas de la monocapa inferior (figura 4.15), es decir, es mayor que el observado para el caso sin desorden.

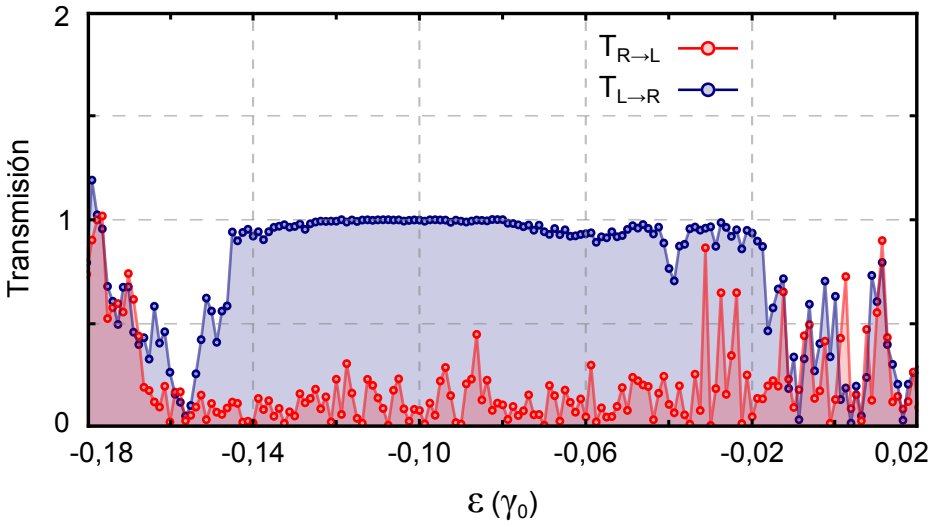


Figura 4.26: Transmisiones entre los cables L y R en función de la energía electrónica para el sistema formado por una bicapa de grafeno semicubierta con apilamiento de tipo Bernal y bordes zigzag, en presencia de un campo eléctrico externo perpendicular a la muestra e irradiada con luz láser. La muestra presenta además rugosidad en los bordes de la capa inferior y 0,1 % de vacancias distribuidas al azar.

Las conclusiones obtenidas para la bicapa de grafeno irradiada con desorden son análogas a las determinadas para el sistema con términos de acople de tipo Haldane. Sin embargo, comparando las figuras anteriores podemos notar que la respuesta es más ruidosa para las muestras iluminadas con luz láser. Tal como se describió para los dispositivos basados en la bicapa de grafeno completa y en ausencia de desorden, estas fluctuaciones se deben a factores como el apagado progresivo de la luz láser y del voltaje de bias (ambos presentes en los experimentos), y el cambio desde una cinta bicapa para la muestra a una monocapa para los cables.

4.4. A modo de resumen

Las heteroestructuras de van der Waals han ganado protagonismo en los últimos años debido a la posibilidad de presentar nuevas propiedades diferentes a las de las capas aisladas [212, 213]. En el presente capítulo explotamos esta cualidad para generar aisladores electrónicos [227], dispositivos que permiten el flujo de carga en una dirección pero no en la opuesta. Para ello diseñamos un sistema finito cuya estructura electrónica sea no recíproca y con estados de borde propagantes en una única dirección, utilizando como base una de las heteroestructuras más sencillas: la bicapa de grafeno bajo la acción de un voltaje de bias externo perpendicular.

Mediante la incorporación de términos de acople de tipo Haldane o spin-órbita intrínsecos, o por la irradiación de la muestra con luz láser circularmente polarizada, una de las capas de la heteroestructura propuesta exhibe propiedades de aislante topológico mientras que la otra es metálica (presenta un espectro continuo) en el rango de energía de interés. Si bien la estructura electrónica bulk del sistema en su conjunto no tiene un gap, encontramos estados quirales subyacentes propios del aislante topológico. La hibridización de estos estados con la banda continua de la capa metálica genera el “apagado” de los estados localizados en un dado borde del aislante topológico, lo cual se refleja en una asimetría direccional en las propiedades de transporte de carga, spin o valle del sistema.

La selectividad de la demolición de los estados de borde de la capa con propiedades topológicas tiene su origen en la alta polarización en subred de los mismos. En un aislante topológico bidimiensional tradicional, este “apagado” selectivo está prohibido por la correspondencia bulk-borde. Sin embargo, en los sistemas propuestos esta restricción no está presente debido a que la heteroestructura de van der Waals como un todo es metálica en el rango de energía estudiado.

En presencia de desorden y rugosidad en la muestra, el mecanismo de selectividad basado en la polarización en subred de los estados es frágil. Con el objetivo de conservar la robustez de los estados topológicos al mismo tiempo que se explota la no-reciprocidad propia del sistema, diseñamos un nuevo arreglo geométrico en el cual uno de los bordes de la cinta se encuentra destapado (mitad de la cinta es bicapa y la otra mitad monocapa de grafeno). De esta manera conseguimos, en presencia de imperfecciones de la red, no sólo preservar el transporte unidireccional

sino también incrementar el rango de energía donde el dispositivo se comporta como un aislador electrónico. Es por esto que el sistema bicapa de grafeno semicubierto resultante se denomina anti-frágil.

Los parámetros empleados en las simulaciones computacionales de los sistemas presentados fueron elegidos de manera tal de ilustrar el efecto de no-reciprocidad en las propiedades espectrales y de transporte. Por ejemplo, es conocido que la bicapa de grafeno presenta un bajo acoplamiento spin-órbita [242, 243], menor al utilizado en el presente capítulo. Sin embargo, es de esperar que el mismo comportamiento físico pueda observarse en otros sistemas como el siliceno donde la interacción spin-órbita es mayor [244, 245].

La estructura electrónica y las propiedades de transporte de la bicapa de grafeno irradiada con luz láser circularmente polarizada se calcularon empleando la Teoría de Floquet. Específicamente se trabajó en el régimen de alta frecuencia, donde en el rango de energía de interés (en el cual se observa asimetría en el transporte) la única réplica de Floquet con peso espectral es aquella con $n = 0$. Por otra parte, en el espacio de Floquet, la radiación incorpora un término de acoplamiento complejo neto a segundos vecinos (a través de un sitio intermedio localizado en una réplica diferente). Es por esto que los dos modelos presentados en el capítulo (con términos de Haldane e irradiado), y las respuestas determinadas para los mismos, son en cierto grado equivalentes.

Los resultados aquí presentados fueron publicados en los siguientes trabajos: L. E. F. Foa Torres, V. Dal Lago y E. Suárez Morell, «Crafting zero-bias one-way transport of charge and spin», Physical Review B **93**, 075438 (2016) y V. Dal Lago, E. Suárez Morell y L. E. F. Foa Torres, «One-way transport in laser-illuminated bilayer graphene: A Floquet isolator», Physical Review B **96**, 235409 (2017).

CAPÍTULO 5

CONCLUSIÓN

Los materiales aislantes topológicos, y en particular aquellos de baja dimensión, han suscitado un gran interés en ciencia básica y aplicada especialmente en lo referido a nanodispositivos y computadoras cuánticas. La robustez y direccionalidad de los estados conductores presentes en los bordes de los mismos son dos de las principales ventajas asociadas. Es por esto que la manipulación y dirección de dichos estados topológicos es un tema de investigación en constante avance, permitiendo descubrir nuevas propiedades o modificar las preexistentes. De esta forma es posible concebir, tal como mostramos en esta tesis, el desarrollo de dispositivos electrónicos análogos a aquellos de gran uso en la óptica física como son los divisores de haces y los aisladores.

Una muestra de grafeno adquiere propiedades topológicas cuando se la coloca bajo la acción de un campo magnético externo. La fase tipo Hall cuántica entera que se genera ha sido ampliamente estudiada tal es así que, debido a la robustez de las conductancias asociadas a altas temperaturas, en la actualidad es empleada como referencia de la resistencia eléctrica en metrología [103]. Sin embargo, la presencia de defectos, principalmente aquellos que unen bordes opuestos del sistema, puede llegar a comprometer esta respuesta. Esto sucede por ejemplo en muestras de grafeno policristalinas, donde los bordes de grano actúan como defectos lineales extendidos.

En la presente tesis mostramos cómo una única línea de defectos modifica las conductancias local y no-local del grafeno en el régimen Hall cuántico entero. Si bien consideramos defectos extendidos cuyas estructuras son de tipo 5-8-5 y 5-7-7-5, la misma física se espera para otros modelos. Comprobamos que los resultados dependen fuertemente de la ubicación del defecto respecto de los bordes de la muestra y las sondas de voltaje o corriente. En particular, si la línea de defectos se encuentra paralela a los bordes, nuevos canales de conducción se generan a lo largo de la misma. De esta manera, el sistema en su conjunto se comporta como dos resistores en paralelo, incrementando o conservando los plateaus de conductancia según la energía de trabajo. Esta dependencia está determinada por los detalles microscópicos propios de la línea de defectos [72].

Por el contrario, un efecto diferente y prometedor se observa cuando el defecto lineal puentea bordes opuestos de la hoja de grafeno bajo la acción de un campo magnético externo. En primer lugar comprobamos que la respuesta Hall depende fuertemente de la ubicación de las sondas de voltaje. Si ambas se encuentran del mismo lado del defecto, la conductancia Hall es idéntica a la de una muestra de grafeno prístina; de lo contrario, ésta se asemeja más a la respuesta local (a dos terminales). En segundo lugar, y aún más interesante, el defecto lineal actúa como un puente por donde los electrones pueden intercambiar el borde y por ende el sentido de movimiento. Según la energía a la cual se trabaje y los detalles microscópicos del defecto, este canal está “abierto” o “cerrado”. La línea de defectos permite entonces manipular la corriente eléctrica en la muestra, actuando como el análogo electrónico del divisor de haces en óptica [72].

Los defectos lineales en grafeno pueden, además de originarse naturalmente en los bordes de grano, ser diseñados artificialmente. Experimentalmente ya se ha logrado crecer una línea de defectos 5-8-5 en ubicaciones predeterminadas de una muestra de grafeno suspendida [68]. Este es el primer paso para su futura aplicación en nanodispositivos donde, comportándose como divisor de haces electrónicos, posibilita la realización de funciones lógicas mediante la manipulación de las corrientes que fluyen a través de los estados topológicos de borde.

Un segundo método de manipulación de los estados topológicos estudiado en esta tesis corresponde a su creación y eliminación empleando potenciales dependientes del tiempo. Utilizamos como base el modelo unidimensional de Su-Schrieffer-Heeger (SSH) para polímeros conductores, el cual se comporta de manera nativa como un aislante topológico [145]. Esto significa que presenta un gap en la estructura de bandas que puede ser trivial (sin estados de borde) o topológico (con estados de mitad de gap), el cual queda determinado por la relación entre los elementos de matriz de hopping intra e intercelda. Empleando la teoría de Floquet comprobamos que, aplicando una perturbación dependiente del tiempo, es posible destruir los estados de borde topológicos o generar nuevos en el caso del sistema trivial.

Una perturbación periódica en el tiempo abre nuevos gaps en la estructura electrónica a la mitad de la energía dada por la frecuencia de la radiación. Al igual que el gap nativo del modelo, los nuevos gaps pueden presentar estados de borde de carácter topológico. Más interesante aún, en esta tesis comprobamos que ambos gaps exhiben transiciones topológicas con el cambio de la frecuencia de la perturbación. De esta forma, el sistema pasa de una fase topológica a una trivial y viceversa, destruyendo los estados de borde presentes o creando nuevos. Estas transiciones tienen su origen en la competencia entre la topología nativa del gap en cuestión y los diferentes procesos asistidos por “fotones”, la cual determina la topología resultante del sistema y la presencia de estados de borde [211].

Además de servir como un simple ejemplo para entender la física de fases topológicas forzadas, el modelo SSH perturbado y nuestros resultados pueden encontrar un área de prueba experimental en la materia ultrafría. El desarrollo actual

de esta última permite manipulaciones de los estados fuera del alcance del campo de la materia condensada. De hecho, además del interés teórico en esta área [248-250], distintos progresos experimentales permitieron realizar el modelo SSH [153], el modelo de Haldane [110] y el modelo de Hofstadter [251], y medir sus respectivos invariantes topológicos [153, 251, 252].

Considerando el caso particular del modelo SSH, el término adicional de perturbación dependiente del tiempo analizado en esta tesis puede ser introducido en los experimentos con átomos fríos mediante la modulación de los láseres usados para producir el potencial dimerizado propio del sistema. La topología de las bandas resultante puede ser caracterizada midiendo el invariante asociado, la fase de Zak. Además, a partir de las técnicas de detección y manipulación de alta resolución desarrolladas en los últimos años [253, 254], es posible detectar la presencia de los estados de borde en un sistema de tamaño finito. De esta forma, la topología del sistema y las distintas transiciones asociadas (particularmente aquellas a mayores frecuencias), así como la destrucción o generación de estados de borde, pueden ser corroboradas experimentalmente.

Un punto aún más promisorio referido al control y manipulación de la corriente eléctrica en un material es alcanzar una condición donde el transporte sea direccional. Esto implica que la corriente de carga, valle o spin fluya entre dos electrodos en una única dirección. Incluso más, este comportamiento puede aprovecharse para construir el análogo eléctrico del aislador óptico [227]. Específicamente corresponde a un dispositivo donde el transporte es posible desde un cable al otro pero no en sentido opuesto y al mismo tiempo la reflexión en cada cable es despreciable.

La alta direccionalidad de los estados de borde en un material aislante topológico resulta una base prometedora para desarrollar un aislador electrónico. Sin embargo, para que la corriente fluya sólo en una dirección, es necesario eliminar uno de ellos. En la presente tesis demostramos cómo suprimir uno de los estados de borde quirales de una muestra de grafeno a la cual se le inducen propiedades topológicas incorporando términos de acople de tipo Haldane o spin-órbita intrínsecos, o mediante la irradiación con luz láser. Para ello nos valemos de una segunda capa de grafeno, que cubre sólo una mitad de la muestra, la cual tiene comportamiento metálico a la energía de interés. La hibridización entre el estado de borde y el continuo de la segunda capa de grafeno posibilita la eliminación del primero en esta heteroestructura de van der Waals [246, 247].

Si bien la estructura electrónica total de la heteroestructura en su conjunto no presenta un gap, los estados de borde topológicos pueden coexistir con las bandas y, más aun, uno de ellos puede ser selectivamente “apagado”. Por el contrario, el estado presente en el otro borde conserva la robustez otorgada por el carácter topológico del material. En un aislante topológico bidimensional, la eliminación selectiva de uno de los estados está imposibilitada por la correspondencia bulk-borde, una restricción que evitamos en nuestra propuesta mediante la incorporación de la segunda capa de grafeno. De esta manera construimos una estructura de bandas no recíproca

con estados de borde propagantes en una única dirección, la cual aprovechamos para obtener transporte direccional de carga, spin o valle. Aun más, eligiendo una geometría adecuada, conseguimos que el aislador electrónico no sólo sea resiliente al desorden sino que mejore con el mismo [246, 247].

A nivel experimental, los aisladores electrónicos propuestos pueden ser construidos dentro de un mismo material como por ejemplo una bicapa de grafeno mediante la aplicación de un voltaje de bias perpendicular. Este último permite que, aun cuando ambas capas presentan propiedades topológicas inducidas, existen rangos de energía donde una de ellas se comporta como un metal. Por otra parte, en materia condensada la radiación con luz láser sobre la muestra permite generar términos de acople de tipo Haldane efectivos. El modelo de grafeno con términos de acople de tipo Haldane también ha sido realizado en átomos ultrafríos [110]. De esta manera es posible producir dispositivos de optoeléctronica que hasta el momento han sido esquivos.

Si en lugar de términos de acople de tipo Haldane consideramos aquellos de tipo spin-órbita intrínsecos, se obtiene un transporte unidireccional de spin y valle puro a corriente nula. Aun cuando este acople es pequeño en la bicapa de grafeno prístina, los dispositivos propuestos pueden ser realizados físicamente. Como primera alternativa, existe evidencia teórica y experimental que indica que un acoplamiento spin-órbita puede ser adquirido mediante defectos [255] o usando un sustrato específico [256], de manera tal que éste podría inducirse en una de las capas. Una segunda opción consiste en el empleo de otros materiales bidimensionales, como ser el siliceno. El mismo presenta una estructura de red equivalente a la del grafeno pero, al estar compuesto por un elemento más pesado, su acoplamiento spin-órbita es más fuerte [244, 245].

Las corrientes unidireccionales obtenidas pueden ser detectadas experimentalmente a través de medidas de transporte no locales [257-259]. Nuestros resultados pueden ser también aplicables en otros aislantes topológicos ultrafinos [260] y heteroestructuras de van der Waals diferentes a la bicapa de grafeno [212]. Los modelos considerados ofrecen una representación simple y mínima para ilustrar el fenómeno físico subyacente de transporte unidireccional obtenido a partir de la manipulación de los estados de borde en un material aislante topológico.

El descubrimiento del efecto Hall cuántico entero y su posterior explicación teórica en la década de 1980 sentaron el primer cimiento para la utilización de argumentos topológicos en la física de la materia condensada. Originariamente se creía que para inducir propiedades topológicas en un material era necesario introducir una perturbación externa. Sin embargo, hoy sabemos que existen materiales topológicos nativos o intrínsecos y que predominan más allá de lo imaginado. Según una investigación teórica reciente entre un 10 % y un 30 % de los materiales presentan propiedades topológicas conformando, potencialmente, un conjunto de decenas de miles de compuestos [261]. Pero hasta el momento sólo unos cientos fueron descu-

biertos, por lo que existe todavía un gran terreno adonde buscar nuevos y tal vez diferentes estados de la materia. Es así que el campo de la física de los materiales topológicos se encuentra en plena expansión.

La mayoría de los materiales estudiados hasta el momento que presentan comportamiento topológico, incluidos aquellos teorizados recientemente [261], fueron relativamente sencillos de analizar. Esto se debe a que la repulsión electrostática experimentada por cada cuasipartícula en su interior, y generada por las restantes, es baja, por lo que es posible modelar las mismas como partículas no interactuantes. El próximo gran desafío, para los físicos teóricos del área de los aislantes topológicos, es entonces abordar el estudio de aquellos sistemas que presentan electrones fuertemente interactuantes [262-264].

Un segundo eje de investigación en auge, y relacionado al anterior, corresponde al análisis de sistemas topológicos abiertos con disipación de energía [265-267]. Los materiales topológicos son generalmente estudiados en equilibrio, es decir, son descriptos mediante el formalismo del Hamiltoniano. Sin embargo, la respuesta de estos sistemas fuera del equilibrio es de gran interés especialmente para una futura aplicación en computación cuántica, donde la disipación de energía es uno de los principales obstáculos para su desarrollo e implementación. Estos dos campos de investigación emergentes establecen nuevas perspectivas y pueden traer aparejados fenómenos físicos hasta el momento desconocidos.

En conclusión, efectos topológicos pueden estar ocultos en muchos materiales comúnmente empleados y también en otros por descubrir. Ya sea que existan de manera nativa o que sean generados por perturbaciones externas, presentes en sistemas de baja dimensión (como los aquí estudiados) o también en materiales tridimensionales, los estados topológicos no parecen ser inusuales. De hecho, algunas de las propiedades fundamentales de las partículas subatómicas son topológicas. La física de los aislantes topológicos tiene como finalidad comprender la naturaleza de este tipo de materia, y explotar sus ventajas en futuras aplicaciones industriales. La manipulación y el control de los estados topológicos presentes en estos materiales, como los casos analizados en esta tesis, abren futuras líneas de investigación para comprenderlos, aprovecharlos y extender su aplicación hacia la construcción de nuevos dispositivos.

El corazón de esta joven área de materiales topológicos es la interacción entre dos ramas de las ciencias duras: la matemática y la física. Como sugiere Charles Kane [268], uno de sus principales investigadores, lo que nos impulsa es la unión de algo que es al mismo tiempo increíblemente bello y parte del mundo real.

BIBLIOGRAFÍA

[1]K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva y A. A. Firsov, «Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films», Science **306**, 666-669 (2004).

[2]J. C. Meyer, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, T. J. Booth y S. Roth, «The structure of suspended graphene sheets», Nature **446**, 60-63 (2007).

[3]A. K. Geim, «Graphene: Status and Prospects», Science **324**, 1530-1534 (2009).

[4]P. Avouris y F. Xia, «Graphene applications in electronics and photonics», MRS Bulletin **37**, 1225-1234 (2012).

[5]A. C. Ferrari y col., «Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems», Nanoscale **7**, 4598-4810 (2015).

[6]L. E. F. Foa Torres, S. Roche y J. C. Charlier, *Introduction to Graphene-Based Nanomaterials: From Electronic Structure to Quantum Transport* (Cambridge University Press, 2014).

[7]B. Lalmi, H. Oughaddou, H. Enriquez, A. Kara, S. Vizzini, B. Ealet y B. Aufray, «Epitaxial growth of a silicene sheet», Applied Physics Letters **97**, 223109 (2010).

[8]P. Vogt, P. De Padova, C. Quaresima, J. Avila, E. Frantzeskakis, M. C. Asensio, A. Resta, B. Ealet y G. Le Lay, «Silicene: Compelling Experimental Evidence for Graphenelike Two-Dimensional Silicon», Physical Review Letters **108**, 155501 (2012).

[9]A. Fleurence, R. Friedlein, T. Ozaki, H. Kawai, Y. Wang e Y. Yamada-Takamura, «Experimental Evidence for Epitaxial Silicene on Diboride Thin Films», Physical Review Letters **108**, 245501 (2012).

[10]H. Liu, A. T. Neal, Z. Zhu, Z. Luo, X. Xu, D. Tománek y P. D. Ye, «Phosphorene: An Unexplored 2D Semiconductor with a High Hole Mobility», ACS Nano **8**, PMID: 24655084, 4033-4041 (2014).

[11]L. Li, Y. Yu, G. J. Ye, Q. Ge, X. Ou, H. Wu, D. Feng, X. H. Chen e Y. Zhang, «Black phosphorus field-effect transistors», Nature Nanotechnology **9**, 372-377 (2014).

[12]M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi y S.-C. Zhang, «Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells», Science **318**, 766-770 (2007).

[13]B. A. Bernevig, T. L. Hughes y S.-C. Zhang, «Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells», Science **314**, 1757-1761 (2006).

[14]K. v. Klitzing, G. Dorda y M. Pepper, «New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance», Physical Review Letters **45**, 494-497 (1980).

[15]M. Z. Hasan y C. L. Kane, «Colloquium», Review of Modern Physics **82**, 3045-3067 (2010).

[16]X.-L. Qi y S.-C. Zhang, «Topological insulators and superconductors», Review of Modern Physics **83**, 1057-1110 (2011).

[17]C. for Physics of the Royal Swedish Academy of Sciences, ed., *Scientific background on the Nobel Prize in Physics 2010: Graphene* (2010).

[18]C. for Physics of the Royal Swedish Academy of Sciences, ed., *Scientific background on the Nobel Prize in Physics 2016: Topological phase transitions and topological phases of matter* (2016).

[19]H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl y R. E. Smalley, «C60: Buckminsterfullerene», Nature **318**, 162-163 (1985).

[20]P. R. Buseck, S. J. Tsipursky y R. Hettich, «Fullerenes from the Geological Environment», Science **257**, 215-217 (1992).

[21]S. Iijima, «Helical microtubules of graphitic carbon», Nature **354**, 56-58 (1991).

[22]M. Terrones, «Science and Technology of the Twenty-First Century: Synthesis, Properties, and Applications of Carbon Nanotubes», Annual Review of Materials Research **33**, 419-501 (2003).

[23]K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos y A. A. Firsov, «Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene.», Nature **438**, 197-200 (2005).

[24]Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer y P. Kim, «Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene.», Nature **438**, 201-4 (2005).

[25]A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov y A. K. Geim, «The electronic properties of graphene», Review of Modern Physics **81**, 109-162 (2009).

[26]C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar y J. Hone, «Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene», Science **321**, 385-388 (2008).

[27]S. Ghosh, I. Calizo, D. Teweldebrhan, E. P. Pokatilov, D. L. Nika, A. A. Balandin, W. Bao, F. Miao y C. N. Lau, «Extremely high thermal conductivity of graphene: Prospects for thermal management applications in nanoelectronic circuits», Applied Physics Letters **92**, 151911 (2008).

[28]A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao y C. N. Lau, «Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene», Nano Letters **8**, PMID: 18284217, 902-907 (2008).

[29]X. Wang, Y. Ouyang, X. Li, H. Wang, J. Guo y H. Dai, «Room-Temperature All-Semiconducting Sub-10-nm Graphene Nanoribbon Field-Effect Transistors», Physical Review Letters **100**, 206803 (2008).

[30]J.-H. Chen, C. Jang, S. Xiao, M. Ishigami y M. S. Fuhrer, «Intrinsic and extrinsic performance limits of graphene devices on SiO2.», Nature Nanotechnology **3**, 206-9 (2008).

[31]F. Bonaccorso, Z. Sun, T. Hasan y A. C. Ferrari, «Graphene photonics and optoelectronics», Nature Photonics **4**, 611-622 (2010).

[32]M. Peplow, «The quest for supercarbon», Nature **503**, 327-329 (2013).

[33]F. Xia, D. B. Farmer, Y.-m. Lin y P. Avouris, «Graphene Field-Effect Transistors with High On/Off Current Ratio and Large Transport Band Gap at Room Temperature», Nano Letters **10**, PMID: 20092332, 715-718 (2010).

[34]S.-J. Han, A. V. Garcia, S. Oida, K. A. Jenkins y W. Haensch, «Graphene radio frequency receiver integrated circuit», Nature Communications **5**, 3086 (2014).

[35]E. Gibney, «The super materials that could trump graphene», Nature **522**, 274-276 (2015).

[36]D. Cohen-Tanugi y J. C. Grossman, «Water Desalination across Nanoporous Graphene», Nano Letters **12**, PMID: 22668008, 3602-3608 (2012).

[37]S. P. Surwade, S. N. Smirnov, I. V. Vlassiouk, R. R. Unocic, G. M. Veith, S. Dai y S. M. Mahurin, «Water desalination using nanoporous single-layer graphene», Nature Nanotechnology **10**, 459-464 (2015).

[38]L. Vicarelli, M. S. Vitiello, D. Coquillat, A. Lombardo, A. C. Ferrari, W. Knap, M. Polini, V. Pellegrini y A. Tredicucci, «Graphene field-effect transistors as room-temperature terahertz detectors», Nature Materials **11**, 865-871 (2012).

[39]X. Cai y col., «Sensitive room-temperature terahertz detection via the photothermoelectric effect in graphene», Nature Nanotechnology **9**, 814-819 (2014).

[40]O. Leenaerts, B. Partoens y F. M. Peeters, «Graphene: A perfect nanoballoon», Applied Physics Letters **93**, 193107 (2008).

[41]M. Miao, M. B. Nardelli, Q. Wang e Y. Liu, «First principles study of the permeability of graphene to hydrogen atoms.», Phys Chem Chem Phys **15**, 16132-7 (2013).

[42]W. Cai, A. L. Moore, Y. Zhu, X. Li, S. Chen, L. Shi y R. S. Ruoff, «Thermal Transport in Suspended and Supported Monolayer Graphene Grown by Chemical Vapor Deposition», Nano Letters **10**, 1645-1651 (2010).

[43]J.-U. Lee, D. Yoon, H. Kim, S. W. Lee y H. Cheong, «Thermal conductivity of suspended pristine graphene measured by Raman spectroscopy», Physical Review B **83**, 081419 (2011).

[44]X. Xu y col., «Length-dependent thermal conductivity in suspended single-layer graphene», Nature Communications **5**, 3689 (2014).

[45]A. S. Mayorov y col., «Micrometer-Scale Ballistic Transport in Encapsulated Graphene at Room Temperature», Nano Letters **11**, PMID: 21574627, 2396-2399 (2011).

[46]S.-H. Bae, O. Kahya, B. K. Sharma, J. Kwon, H. J. Cho, B. Özyilmaz y J.-H. Ahn, «Graphene-P(VDF-TrFE) Multilayer Film for Flexible Applications», ACS Nano **7**, PMID: 23448089, 3130-3138 (2013).

[47]J.-H. Ahn y B. H. Hong, «Graphene for displays that bend», Nature Nanotechnology **9**, 737-738 (2014).

[48]X. Li, H. Zhu, K. Wang, A. Cao, J. Wei, C. Li, Y. Jia, Z. Li, X. Li y D. Wu, «Graphene-On-Silicon Schottky Junction Solar Cells», Advanced Materials **22**, 2743-2748 (2010).

[49]X. Wang, L. Zhi y K. Müllen, «Transparent, Conductive Graphene Electrodes for Dye-Sensitized Solar Cells», Nano Letters **8**, PMID: 18069877, 323-327 (2008).

[50]C. *. N. *. R. Rao, A. *. K. Sood, K. *. S. Subrahmanyam y A. Govindaraj, «Graphene: The New Two-Dimensional Nanomaterial», Angewandte Chemie International Edition **48**, 7752-7777 (2009).

[51]F. Bonaccorso, A. Lombardo, T. Hasan, Z. Sun, L. Colombo y A. C. Ferrari, «Production and processing of graphene and 2d crystals», Materials Today **15**, 564-589 (2012).

[52]K. S. Novoselov, V. I. Fal'Ko, L. Colombo, P. R. Gellert, M. G. Schwab y K. Kim, «A roadmap for graphene», Nature **490**, 192-200 (2012).

[53]A. Reina, X. Jia, J. Ho, D. Nezich, H. Son, V. Bulovic, M. S. Dresselhaus y J. Kong, «Large Area, Few-Layer Graphene Films on Arbitrary Substrates by Chemical Vapor Deposition», Nano Letters **9**, PMID: 19046078, 30-35 (2009).

[54]D. Wei, Y. Liu, Y. Wang, H. Zhang, L. Huang y G. Yu, «Synthesis of N-Doped Graphene by Chemical Vapor Deposition and Its Electrical Properties», Nano Letters **9**, PMID: 19326921, 1752-1758 (2009).

[55]K. V. Emtsev y col., «Towards wafer-size graphene layers by atmospheric pressure graphitization of silicon carbide», Nature Materials **8**, 203-207 (2009).

[56]W. A. de Heer, C. Berger, M. Ruan, M. Sprinkle, X. Li, Y. Hu, B. Zhang, J. Hankinson y E. Conrad, «Large area and structured epitaxial graphene produced by confinement controlled sublimation of silicon carbide», Proceedings of the National Academy of Sciences **108**, 16900-16905 (2011).

[57]M. Choucair, P. Thordarson y J. A. Stride, «Gram-scale production of graphene based on solvothermal synthesis and sonication», Nature Nanotechnology **4**, 30-33 (2009).

[58]M. V. Bracamonte, G. I. Lacconi, S. E. Urreta y L. E. F. Foa Torres, «On the Nature of Defects in Liquid-Phase Exfoliated Graphene», The Journal of Physical Chemistry C **118**, 15455-15459 (2014).

[59]S. Bae y col., «Roll-to-roll production of 30-inch graphene films for transparent electrodes», Nature Nanotechnology **5**, 574-578 (2010).

[60]A. Fasolino, J. H. Los y M. I. Katsnelson, «Intrinsic ripples in graphene», Nature Materials **6**, 858-861 (2007).

[61]C. Stampfer, J. Güttinger, S. Hellmüller, F. Molitor, K. Ensslin y T. Ihn, «Energy Gaps in Etched Graphene Nanoribbons», Physical Review Letters **102**, 056403 (2009).

[62]M. Terrones y col., «Graphene and graphite nanoribbons: Morphology, properties, synthesis, defects and applications», Nano Today **5**, 351-372 (2010).

[63]O. V. Yazyev y S. G. Louie, «Electronic transport in polycrystalline graphene», Nature Materials **9**, 806-809 (2010).

[64]A. Lherbier, S. M. .-.-M. Dubois, X. Declerck, S. Roche, Y.-M. Niquet y J.-C. Charlier, «Two-Dimensional Graphene with Structural Defects: Elastic Mean Free Path, Minimum Conductivity, and Anderson Transition», Physical Review Letters **106**, 046803 (2011).

[65]A. W. Cummings, D. L. Duong, V. L. Nguyen, D. Van Tuan, J. Kotakoski, J. E. Barrios Vargas, Y. H. Lee y S. Roche, «Charge Transport in Polycrystalline Graphene: Challenges and Opportunities», Advanced Materials **26**, 5079-5094 (2014).

[66]F. Banhart, J. Kotakoski y A. V. Krasheninnikov, «Structural Defects in Graphene», ACS Nano **5**, PMID: 21090760, 26-41 (2011).

[67]P. Y. Huang y col., «Grains and grain boundaries in single-layer graphene atomic patchwork quilts», Nature **469**, 389-392 (2011).

[68]J. H. Chen, G. Autès, N. Alem, F. Gargiulo, A. Gautam, M. Linck, C. Kisielowski, O. V. Yazyev, S. G. Louie y A. Zettl, «Controlled growth of a line defect in graphene and implications for gate-tunable valley filtering», Physical Review B **89**, 121407 (2014).

[69]A. R. Botello-Mendez, X. Declerck, M. Terrones, H. Terrones y J. C. Charlier, «One-dimensional extended lines of divacancy defects in graphene», Nanoscale **3**, 2868-2872 (2011).

[70]J. Lahiri, Y. Lin, P. Bozkurt, I. I. Oleynik y M. Batzill, «An extended defect in graphene as a metallic wire», Nature Nanotechnology **5**, 326-329 (2010).

[71]J. Song, H. Liu, H. Jiang, Q.-f. Sun y X. C. Xie, «One-dimensional quantum channel in a graphene line defect», Physical Review B **86**, 085437 (2012).

[72]V. Dal Lago y L. E. F. Foa Torres, «Line defects and quantum Hall plateaus in graphene», Journal of Physics: Condensed Matter **27**, 145303 (2015).

[73]D. Gunlycke y C. T. White, «Graphene Valley Filter Using a Line Defect», Physical Review Letter **106**, 136806 (2011).

[74]L. H. Ingaramo y L. E. F. F. Torres, «Valley filtering by a line-defect in graphene: quantum interference and inversion of the filter effect», Journal of Physics: Condensed Matter **28**, 485302 (2016).

[75]P. Atkins y J. de Paula, *Atkins' Physical Chemistry*, 10 (Oxford University Press, 2014).

[76]J. C. Charlier, X. Gonze y J. P. Michenaud, «Graphite Interplanar Bonding: Electronic Delocalization and van der Waals Interaction», Europhysics Letters **28**, 403 (1994).

[77]P. R. Wallace, «The Band Theory of Graphite», Physical Review **71**, 622-634 (1947).

[78]N. W. Ashcroft y N. D. Mermin, *Solid state physics* (Saunders College, Philadelphia, United States., 1976).

[79]R. Saito, G. Dresselhaus y M. S. Dresselhaus, *Physical Properties of Carbon Nanotubes* (Imeprial College Press, London, 1998).

[80]S. M. M. Dubois, Z. Zanolli, X. Declerck y J. C. Charlier, «Electronic properties and quantum transport in Graphene-based nanostructures», The European Physical Journal B **72**, 1-24 (2009).

[81]F. Bloch, « Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern», Zeitschrift f ür Physik **52**, 555-600 (1929).

[82]P. A. M. Dirac, *The principles of quantum mechanics*, 3a., International series of monographs on physics (Clarendon Press, Oxford, 1947).

[83]R. S. Deacon, K. C. Chuang, R. J. Nicholas, K. S. Novoselov y A. K. Geim, «Cyclotron resonance study of the electron and hole velocity in graphene monolayers», Physical Review B **76**, 081406 (2007).

[84]D. Xiao, M.-C. Chang y Q. Niu, «Berry phase effects on electronic properties», Review of Modern Physics **82**, 1959-2007 (2010).

[85]M. Y. Han, B. Özyilmaz, Y. Zhang y P. Kim, «Energy Band-Gap Engineering of Graphene Nanoribbons», Physical Review Letters **98**, 206805 (2007).

[86]T. Tanaka, A. Tajima, R. Moriizumi, M. Hosoda, R. Ohno, E. Rokuta, C. Oshima y S. Otani, «Carbon nano-ribbons and their edge phonons», Solid State Communications **123**, 33-36 (2002).

[87]J. Baringhaus y col., «Exceptional ballistic transport in epitaxial graphene nanoribbons», Nature **506**, 349-354 (2014).

[88]D. V. Kosynkin, A. L. Higginbotham, A. Sinitskii, J. R. Lomeda, A. Dimiev, B. K. Price y J. M. Tour, «Longitudinal unzipping of carbon nanotubes to form graphene nanoribbons», Nature **458**, 872-876 (2009).

[89]L. Jiao, L. Zhang, X. Wang, G. Diankov y H. Dai, «Narrow graphene nanoribbons from carbon nanotubes», Nature **458**, 877-880 (2009).

[90] L. H. Ingaramo, «Transporte de carga en nanoestructuras de carbono en presencia de defectos», Tesis doct. (Universidad Nacional de Córdoba, 10 de 2016).

[91] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus y M. S. Dresselhaus, «Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence», Physical Review B **54**, 17954-17961 (1996).

[92] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale y M. den Nijs, «Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential», Physical Review Letters **49**, 405-408 (1982).

[93] M. V. Berry, «Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes», Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences **392**, 45-57 (1984).

[94] M. Nakahara, *Geometry, topology and physics*, ed. por P. D. F. Brewer, 2da. edición, Graduate Student Series in Physics (Taylor and Francis, New York, London, 2003).

[95] J. E. Moore, «The birth of topological insulators», Nature **464**, 194-198 (2010).

[96] E. H. Hall, «On a New Action of the Magnet on Electric Currents», American Journal of Mathematics **2**, 287-292 (1879).

[97] L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *Quantum mechanics: non-relativistic theory*, 3a. edición, Course of theoretical physics (Pergamon Press, Great Britain, 1977).

[98] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, 1995).

[99] M. Büttiker, «Absence of backscattering in the quantum Hall effect in multiprobe conductors», Physical Review B **38**, 9375-9389 (1988).

[100] J. W. McClure, «Diamagnetism of Graphite», Physical Review **104**, 666-671 (1956).

[101] M. O. Goerbig, «Electronic properties of graphene in a strong magnetic field», Review of Modern Physics **83**, 1193-1243 (2011).

[102] K. S. Novoselov, Z. Jiang, Y. Zhang, S. V. Morozov, H. L. Stormer, U. Zeitler, J. C. Maan, G. S. Boebinger, P. Kim y A. K. Geim, «Room-Temperature Quantum Hall Effect in Graphene», Science **315**, 1379-1379 (2007).

[103] R. Ribeiro-Palau y col., «Quantum Hall resistance standard in graphene devices under relaxed experimental conditions», Nature Nanotechnology **10**, 965-971 (2015).

[104] R. B. Laughlin, «Quantized Hall conductivity in two dimensions», Physical Review B **23**, 5632-5633 (1981).

[105] K. D. Joshi, *Introduction to General Topology* (John Wiley & Sons, New York, 1983).

[106] A. B. Bernevig y T. L. Hughes, *Topological insulators and topological superconductors* (Princeton University Press, Princeton and Oxford, 2013).

[107]J. Zak, «Berry's phase for energy bands in solids», Physical Review Letters **62**, 2747-2750 (1989).

[108]F. D. M. Haldane, «Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly"», Physical Review Letters **61**, 2015-2018 (1988).

[109]C.-Z. Chang y col., «Experimental Observation of the Quantum Anomalous Hall Effect in a Magnetic Topological Insulator», Science **340**, 167-170 (2013).

[110]G. Jotzu, M. Messer, R. Desbuquois, M. Lebrat, T. Uehlinger, D. Greif y T. Esslinger, «Experimental realization of the topological Haldane model with ultracold fermions», Nature **515**, 237-240 (2014).

[111]C. L. Kane y E. J. Mele, «Quantum Spin Hall Effect in Graphene», Physical Review Letters **95**, 226801 (2005).

[112]C. L. Kane y E. J. Mele, «Z_2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect», Physical Review Letters **95**, 146802 (2005).

[113]M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi y S.-C. Zhang, «Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells», Science **318**, 766-770 (2007).

[114]D. J. Thouless, «Quantization of particle transport», Physical Review B **27**, 6083-6087 (1983).

[115]S. Nakajima, T. Tomita, S. Taie, T. Ichinose, H. Ozawa, L. Wang, M. Troyer e Y. Takahashi, «Topological Thouless pumping of ultracold fermions», Nature Physics **12**, 296-300 (2016).

[116]T. Oka y H. Aoki, «Photovoltaic Hall effect in graphene», Physical Review B **79**, 081406 (2009).

[117]T. Kitagawa, T. Oka, A. Brataas, L. Fu y E. Demler, «Transport properties of nonequilibrium systems under the application of light: Photoinduced quantum Hall insulators without Landau levels», Physical Review B **84**, 235108 (2011).

[118]N. H. Lindner, G. Refael y V. Galitski, «Floquet topological insulator in semiconductor quantum wells», Nature Physics **7**, 490-495 (2011).

[119]P. M. Perez-Piskunow, G. Usaj, C. A. Balseiro y L. E. F. Foa Torres, «Floquet chiral edge states in graphene», Physical Review B **89**, 121401 (2014).

[120]G. Floquet, «Sur les équations différentielles linéaires à coefficients périodiques», fre, Annales scientifiques de l'École Normale Supérieure **12**, 47-88 (1883).

[121]J. Cayssol, B. Dóra, F. Simon y R. Moessner, «Floquet topological insulators», Physica Status Solidi (RRL) – Rapid Research Letters **7**, 101-108 (2013).

[122]A. Gómez-León y G. Platero, «Floquet-Bloch Theory and Topology in Periodically Driven Lattices», Physical Review Letters **110**, 200403 (2013).

[123]Y. Tenenbaum Katan y D. Podolsky, «Generation and manipulation of localized modes in Floquet topological insulators», Physical Review B **88**, 224106 (2013).

[124]Y. T. Katan y D. Podolsky, «Modulated Floquet Topological Insulators», Physical Review Letters **110**, 016802 (2013).

[125]M. Bukov, L. D'Alessio y A. Polkovnikov, «Universal high-frequency behavior of periodically driven systems: from dynamical stabilization to Floquet engineering», Advances in Physics **64**, 139-226 (2015).

[126]E. Suárez Morell y L. E. F. Foa Torres, «Radiation effects on the electronic properties of bilayer graphene», Physical Review B **86**, 125449 (2012).

[127]M. Benito, A. Gómez-León, V. M. Bastidas, T. Brandes y G. Platero, «Floquet engineering of long-range p-wave superconductivity», Physical Review B **90**, 205127 (2014).

[128]H. L. Calvo, L. E. F. Foa Torres, P. M. Perez-Piskunow, C. A. Balseiro y G. Usaj, «Floquet interface states in illuminated three-dimensional topological insulators», Physical Review B **91**, 241404 (2015).

[129]Y. H. Wang, H. Steinberg, P. Jarillo-Herrero y N. Gedik, «Observation of Floquet-Bloch States on the Surface of a Topological Insulator», Science **342**, 453-457 (2013).

[130]F. Mahmood, C.-K. Chan, Z. Alpichshev, D. Gardner, Y. Lee, P. A. Lee y N. Gedik, «Selective scattering between Floquet-Bloch and Volkov states in a topological insulator», Nature Physics **12**, 306-310 (2016).

[131]M. C. Rechtsman, J. M. Zeuner, Y. Plotnik, Y. Lumer, D. Podolsky, F. Dreisow, S. Nolte, M. Segev y A. Szameit, «Photonic Floquet topological insulators», Nature **496**, 196-200 (2013).

[132]F. Gao y col., «Probing topological protection using a designer surface plasmon structure», Nature Communications **7**, 11619 (2016).

[133]G. Usaj, P. M. Perez-Piskunow, L. E. F. Foa Torres y C. A. Balseiro, «Irradiated graphene as a tunable Floquet topological insulator», Physical Review B **90**, 115423 (2014).

[134]J. P. Dahlhaus, B. M. Fregoso y J. E. Moore, «Magnetization Signatures of Light-Induced Quantum Hall Edge States», Physical Review Letters **114**, 246802 (2015).

[135]M. Thakurathi, A. A. Patel, D. Sen y A. Dutta, «Floquet generation of Majorana end modes and topological invariants», Physical Review B **88**, 155133 (2013).

[136]M. A. Sentef, M. Claassen, A. F. Kemper, B. Moritz, T. Oka, J. K. Freericks y T. P. Devereaux, «Theory of Floquet band formation and local pseudospin textures in pump-probe photoemission of graphene», Nature Communications **6**, 7047 (2015).

[137]L. D'Alessio y M. Rigol, «Dynamical preparation of Floquet Chern insulators», Nature Communications **6**, 8336 (2015).

[138]J. C. Budich y M. Heyl, «Dynamical topological order parameters far from equilibrium», Physical Review B **93**, 085416 (2016).

[139]O. V. Kibis, «Metal-insulator transition in graphene induced by circularly polarized photons», Physical Review B **81**, 165433 (2010).

[140]H. L. Calvo, H. M. Pastawski, S. Roche y L. E. F. Foa Torres, «Tuning laser-induced band gaps in graphene», Applied Physics Letters **98**, 232103 (2011).

[141]S. E. Savel'ev y A. S. Alexandrov, «Massless Dirac fermions in a laser field as a counterpart of graphene superlattices», Physical Review B **84**, 035428 (2011).

[142]H. L. Calvo, P. M. Perez-Piskunow, H. M. Pastawski, S. Roche y L. E. F. F. Torres, «Non-perturbative effects of laser illumination on the electrical properties of graphene nanoribbons», Journal of Physics: Condensed Matter **25**, 144202 (2013).

[143]L. E. F. Foa Torres, P. M. Perez-Piskunow, C. A. Balseiro y G. Usaj, «Multiterminal Conductance of a Floquet Topological Insulator», Physical Review Letters **113**, 266801 (2014).

[144]P. M. Perez-Piskunow, L. E. F. Foa Torres y G. Usaj, «Hierarchy of Floquet gaps and edge states for driven honeycomb lattices», Physical Review A **91**, 043625 (2015).

[145]W. P. Su, J. R. Schrieffer y A. J. Heeger, «Solitons in Polyacetylene», Physical Review Letters **42**, 1698-1701 (1979).

[146]C. L. Fefferman, J. P. Lee-Thorp y M. I. Weinstein, «Topologically protected states in one-dimensional continuous systems and Dirac points», Proceedings of the National Academy of Sciences **111**, 8759-8763 (2014).

[147]L. Li, Z. Xu y S. Chen, «Topological phases of generalized Su-Schrieffer-Heeger models», Physical Review B **89**, 085111 (2014).

[148]T. R. S. A. of Sciences, ed., *The 1972 Nobel Prize in Physics:* (2014).

[149]T. R. S. A. of Sciences, ed., *The Nobel Prize in Chemistry 2000: Conductive polymers* (2014).

[150]R. E. Peierls, *Quantum Theory of Solids* (Oxford Clarendon Press, Oxford, 1955).

[151]R. E. Peierls, *More Surprises in Theoretical Physics* (Princeton University Press, Princeton, 1991).

[152]M. Franz y L. Molenkamp, *Topological Insulators*, ed. por E. Burstein, A. H. MacDonald y P. J. Stiles, vol. 6, Contemporary Concepts of Condensed Matter Science (Elsevier, Amsterdam, Waltham and San Diego, 2013).

[153]M. Atala, M. Aidelsburger, J. T. Barreiro, D. Abanin, T. Kitagawa, E. Demler e I. Bloch, «Direct measurement of the Zak phase in topological Bloch bands», Nature Physics **9**, 795-800 (2013).

[154]M. Zahid Hasan, S. Y. Xu, D. Hsieh, L. A. Wray e Y. Xia, «Experimental Discovery of Topological Surface States - A New Type of 2D Electron Systems (Review Article)», ArXiv e-prints (2014).

[155]L. Fu, C. L. Kane y E. J. Mele, «Topological Insulators in Three Dimensions», Physical Review Letters **98**, 106803 (2007).

[156]J. E. Moore y L. Balents, «Topological invariants of time-reversal-invariant band structures», Physical Review B **75**, 121306 (2007).

[157]R. Roy, «Topological phases and the quantum spin Hall effect in three dimensions», Physical Review B **79**, 195322 (2009).

[158]D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava y M. Z. Hasan, «A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase», Nature **452**, 970-974 (2008).

[159]Y. Xia y col., «Observation of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface», Nature Physics **5**, 398-402 (2009).

[160]H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang y S.-C. Zhang, «Topological insulators in Bi2Se3, Bi2Te3 and Sb2Te3 with a single Dirac cone on the surface», Nature Physics **5**, 438-442 (2009).

[161]M. Z. Hasan, S.-Y. Xu y G. Bian, «Topological insulators, topological superconductors and Weyl fermion semimetals: discoveries, perspectives and outlooks», Physica Scripta **2015**, 014001 (2015).

[162]S.-M. Huang y col., «A Weyl Fermion semimetal with surface Fermi arcs in the transition metal monopnictide TaAs class», Nature Communications **6**, 7373 (2015).

[163]S.-Y. Xu y col., «Observation of Fermi arc surface states in a topological metal», Science **347**, 294-298 (2015).

[164]S.-Y. Xu y col., «Discovery of a Weyl fermion semimetal and topological Fermi arcs», Science **349**, 613-617 (2015).

[165]O. Vafek y A. Vishwanath, «Dirac Fermions in Solids: From High-Tc Cuprates and Graphene to Topological Insulators and Weyl Semimetals», Annual Review of Condensed Matter Physics **5**, 83-112 (2014).

[166]G. van Rossum, *Python tutorial, Technical Report CS-R9526*, inf. téc. (Centrum voor Wiskunde en Informatica (CWI), Amsterdam, 1995).

[167]C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov y X. Waintal, «Kwant: a software package for quantum transport», New Journal of Physics **16**, 063065 (2014).

[168]E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, ed. por M. Cardona, P. Fulde, K. von Klitzgin, R. Merlin, H.-J. Queisser y H. Stormer, 3ra edición, vol. 7, Springer Series in Solid-State Sciences (Springer, Berlin, 2006).

[169]M. Büttiker, «Four-Terminal Phase-Coherent Conductance», Physical Review Letter **57**, 1761-1764 (1986).

[170]D. Vanderbilt, T. Yusufaly y S. Coh, *Python Tight Binding (PythTB)*, 2010.

[171]R. Resta, «Macroscopic polarization in crystalline dielectrics: the geometric phase approach», Review of Modern Physics **66**, 899-915 (1994).

[172]P. M. Ostrovsky, I. V. Gornyi y A. D. Mirlin, «Theory of anomalous quantum Hall effects in graphene», Physical Review B **77**, 195430 (2008).

[173]F. Ortmann y S. Roche, «Splitting of the Zero-Energy Landau Level and Universal Dissipative Conductivity at Critical Points in Disordered Graphene», Physical Review Letters **110**, 086602 (2013).

[174]Y. Liu, J. Song, Y. Li, Y. Liu y Q.-f. Sun, «Controllable valley polarization using graphene multiple topological line defects», Physical Review B **87**, 195445 (2013).

[175]O. V. Yazyev e Y. P. Chen, «Polycrystalline graphene and other two-dimensional materials», Nature Nanotechnology **9**, 755-767 (2014).

[176]F. Lafont y col., «Anomalous dissipation mechanism and Hall quantization limit in polycrystalline graphene grown by chemical vapor deposition», Physical Review B **90**, 115422 (2014).

[177]A. W. Cummings, A. Cresti y S. Roche, «Quantum Hall effect in polycrystalline graphene: The role of grain boundaries», Physical Review B **90**, 161401 (2014).

[178]T. Shen, W. Wu, Q. Yu, C. A. Richter, R. Elmquist, D. Newell e Y. P. Chen, «Quantum Hall effect on centimeter scale chemical vapor deposited graphene films», Applied Physics Letters **99**, 232110 (2011).

[179]R. Peierls, «On the Theory of the Diamagnetism of Conduction Electrons», en *Selected Scientific Papers of Sir Rudolf Peierls*, ed. por R. H. Dalitz y S. R. Peierls (World Scientific Publishing Co, 1997), págs. 97-120.

[180]J. L. Lado, J. W. González y J. Fernández-Rossier, «Quantum Hall effect in gapped graphene heterojunctions», Physical Review B **88**, 035448 (2013).

[181]R. M. Guzmán-Arellano y G. Usaj, Private communication, 2014.

[182]O. V. Yazyev, «Emergence of magnetism in graphene materials and nanostructures», Reports on Progress in Physics **73**, 056501 (2010).

[183]H. U. Baranger y A. D. Stone, «Electrical linear-response theory in an arbitrary magnetic field: A new Fermi-surface formation», Physical Review B **40**, 8169-8193 (1989).

[184]H.-B. Yao, X.-L. Lü e Y.-S. Zheng, «Quantum Hall boundary state around the line defect in graphene», Physical Review B **88**, 235419 (2013).

[185]A. Bergvall, J. M. Carlsson y T. Löfwander, «Influence of [0001] tilt grain boundaries on the destruction of the quantum Hall effect in graphene», Physical Review B **91**, 245425 (2015).

[186]P. W. Anderson, «Absence of Diffusion in Certain Random Lattices», Physical Review **109**, 1492-1505 (1958).

[187]T. Ando y T. Nakanishi, «Impurity Scattering in Carbon Nanotubes – Absence of Back Scattering –», Journal of the Physical Society of Japan **67**, 1704-1713 (1998).

[188] K. Wakabayashi, Y. Takane y M. Sigrist, «Perfectly Conducting Channel and Universality Crossover in Disordered Graphene Nanoribbons», Physical Review Letters **99**, 036601 (2007).

[189] J. Wurm, M. Wimmer y K. Richter, «Symmetries and the conductance of graphene nanoribbons with long-range disorder», Physical Review B **85**, 245418 (2012).

[190] F. Ortmann, A. Cresti, G. Montambaux y S. Roche, «Magnetoresistance in disordered graphene: The role of pseudospin and dimensionality effects unraveled», Europhysics Letters **94**, 47006 (2011).

[191] R. M. Ribeiro, V. M. Pereira, N. M. R. Peres, P. R. Briddon y A. H. C. Neto, «Strained graphene: tight-binding and density functional calculations», New Journal of Physics **11**, 115002 (2009).

[192] A. J. Stone y D. J. Wales, «Theoretical studies of icosahedral C $_{6}0$ and some related species», Chemical Physics Letters **128**, 501-503 (1986).

[193] B. Dóra, J. Cayssol, F. Simon y R. Moessner, «Optically Engineering the Topological Properties of a Spin Hall Insulator», Physical Review Letters **108**, 056602 (2012).

[194] T. Kitagawa, E. Berg, M. Rudner y E. Demler, «Topological characterization of periodically driven quantum systems», Physical Review B **82**, 235114 (2010).

[195] A. J. Heeger, S. Kivelson, J. R. Schrieffer y W. P. Su, «Solitons in conducting polymers», Reviews of Modern Physics **60**, 781-850 (1988).

[196] C. S. Yannoni y T. C. Clarke, «Molecular Geometry of cis- and trans-Polyacetylene by Nutation NMR Spectroscopy», Physical Review Letters **51**, 1191-1193 (1983).

[197] C. R. Fincher, C. E. Chen, A. J. Heeger, A. G. MacDiarmid y J. B. Hastings, «Structural Determination of the Symmetry-Breaking Parameter in trans-$(\mathrm{CH})_x$», Physical Review Letters **48**, 100-104 (1982).

[198] H. Shirakawa, E. J. Louis, A. G. MacDiarmid, C. K. Chiang y A. J. Heeger, «Synthesis of electrically conducting organic polymers: halogen derivatives of polyacetylene, (CH)», Journal of Chemical Society, Chemical Communications, 578-580 (1977).

[199] M. Grifoni y P. Hänggi, «Driven quantum tunneling », Physics Reports **304**, 229-354 (1998).

[200] S. Kohler, J. Lehmann y P. Hänggi, «Driven quantum transport on the nanoscale », Physics Reports **406**, 379-443 (2005).

[201] K. I. Seetharam, C.-E. Bardyn, N. H. Lindner, M. S. Rudner y G. Refael, «Controlled Population of Floquet-Bloch States via Coupling to Bose and Fermi Baths», Physical Review X **5**, 041050 (2015).

[202] J. K. Asbóth, B. Tarasinski y P. Delplace, «Chiral symmetry and bulk-boundary correspondence in periodically driven one-dimensional systems», Physical Review B **90**, 125143 (2014).

[203]E. Schrödinger, «An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules», Physical Review **28**, 1049-1070 (1926).

[204]M. Born y V. Fock, «Beweis des Adiabatensatzes», Zeitschrift für Physik **51**, 165-180 (1928).

[205]J. H. Shirley, «Solution of the Schrödinger Equation with a Hamiltonian Periodic in Time», Physical Review **138**, pages (1965).

[206]H. Sambe, «Steady States and Quasienergies of a Quantum-Mechanical System in an Oscillating Field», Physical Review A **7**, 2203-2213 (1973).

[207]L. E. F. Foa Torres y S. Roche, «Inelastic Quantum Transport and Peierls-Like Mechanism in Carbon Nanotubes», Physical Review Letters **97**, 076804 (2006).

[208]L. E. F. Foa Torres, R. Avriller y S. Roche, «Nonequilibrium energy gaps in carbon nanotubes: Role of phonon symmetries», Physical Review B **78**, 035412 (2008).

[209]A. Kundu, H. A. Fertig y B. Seradjeh, «Effective Theory of Floquet Topological Transitions», Physical Review Letters **113**, 236803 (2014).

[210]Á. Gómez-León, P. Delplace y G. Platero, «Engineering anomalous quantum Hall plateaus and antichiral states with ac fields», Physical Review B **89**, 205408 (2014).

[211]V. Dal Lago, M. Atala y L. E. F. Foa Torres, «Floquet topological transitions in a driven one-dimensional topological insulator», Physical Review A **92**, 023624 (2015).

[212]A. K. Geim e I. V. Grigorieva, «Van der Waals heterostructures», Nature **499**, 419-25 (2013).

[213]K. S. Novoselov, A. Mishchenko, A. Carvalho y A. H. Castro Neto, «2D materials and van der Waals heterostructures», Science **353**, aac9439 (2016).

[214]E. V. Castro, K. S. Novoselov, S. V. Morozov, N. M. R. Peres, J. M. B. Lopes dos Santos, J. Nilsson, F. Guinea, A. K. Geim y A. H. Castro Neto, «Biased Bilayer Graphene: Semiconductor with a Gap Tunable by the Electric Field Effect», Physical Review Letters **99**, 216802 (2007).

[215]J. B. Oostinga, H. B. Heersche, X. Liu, A. F. Morpurgo y L. M. K. Vandersypen, «Gate-induced insulating state in bilayer graphene devices.», Nature Materials **7**, 151-7 (2008).

[216]J. Li, I. Martin, M. Büttiker y A. F. Morpurgo, «Topological origin of subgap conductance in insulating bilayer graphene», Nature Physics **7**, 38-42 (2011).

[217]T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn y E. Rotenberg, «Controlling the Electronic Structure of Bilayer Graphene», Science **313**, 951-954 (2006).

[218]J. Li, I. Martin, M. Büttiker y A. F. Morpurgo, «Marginal topological properties of graphene: a comparison with topological insulators», Physica Scripta **2012**, 014021 (2012).

[219] F. Ortmann, S. Roche, S. O. Valenzuela y L. W. (b. Molenkamp, eds., *Topological Insulators: Fundamentals and Perspectives* (Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Germany., 2015).

[220] O. Shevtsov, P. Carmier, C. Petitjean, C. Groth, D. Carpentier y X. Waintal, «Graphene-Based Heterojunction between Two Topological Insulators», Physical Review X **2**, 031004 (2012).

[221] Y. Baum, T. Posske, I. C. Fulga, B. Trauzettel y A. Stern, «Coexisting Edge States and Gapless Bulk in Topological States of Matter», Physical Review Letters **114**, 136801 (2015).

[222] M. S. Rudner, N. H. Lindner, E. Berg y M. Levin, «Anomalous Edge States and the Bulk-Edge Correspondence for Periodically Driven Two-Dimensional Systems», Physical Review X **3**, 031005 (2013).

[223] P. Titum, E. Berg, M. S. Rudner, G. Refael y N. H. Lindner, «Anomalous Floquet-Anderson Insulator as a Nonadiabatic Quantized Charge Pump», Physical Review X **6**, 021013 (2016).

[224] Z. Gu, H. A. Fertig, D. P. Arovas y A. Auerbach, «Floquet Spectrum and Transport through an Irradiated Graphene Ribbon», Physical Review Letters **107**, 216601 (2011).

[225] L. Du, X. Zhou y G. A. Fiete, «Quadratic band touching points and flat bands in two-dimensional topological Floquet systems», Physical Review B **95**, 035136 (2017).

[226] C. Qu, C. Zhang y F. Zhang, «Valley-Selective Topological Ordered States in Irradiated Bilayer Graphene», ArXiv e-prints (2016).

[227] D. Jalas y col., «What is — and what is not — an optical isolator», Nature Photonics **7**, 579-582 (2013).

[228] R. van Gelderen y C. M. Smith, «Rashba and intrinsic spin-orbit interactions in biased bilayer graphene», Physical Review B **81**, 125435 (2010).

[229] E. Prada, P. San-Jose, L. Brey y H. A. Fertig, «Band topology and the quantum spin Hall effect in bilayer graphene», Solid State Communications **151**, Graphene, 1075-1083 (2011).

[230] H. L. Calvo, P. M. Perez-Piskunow, S. Roche y L. E. F. F. Torres, «Laser-induced effects on the electronic features of graphene nanoribbons», Applied Physics Letters **101**, 253506 (2012).

[231] P. Delplace, Á. Gómez-León y G. Platero, «Merging of Dirac points and Floquet topological transitions in ac-driven graphene», Physical Review B **88**, 245422 (2013).

[232] M. Wimmer, I. Adagideli, S. Berber, D. Tománek y K. Richter, «Spin Currents in Rough Graphene Nanoribbons: Universal Fluctuations and Spin Injection», Physical Review Letters **100**, 177207 (2008).

[233]A. Metelmann y A. A. Clerk, «Nonreciprocal Photon Transmission and Amplification via Reservoir Engineering», Physical Review X **5**, 021025 (2015).

[234]P. W. Brouwer, «Scattering approach to parametric pumping», Physical Review B **58**, 10135 (1998).

[235]E. Prada, P. San-Jose y H. Schomerus, «Quantum pumping in graphene», Physical Review B **80**, 245414 (2009).

[236]L. H. Ingaramo y L. E. F. F. Torres, «Quantum charge pumping in graphene-based devices: When lattice defects do help», Applied Physics Letters **103**, 123508 (2013).

[237]H. Khani, M. Esmaeilzadeh y F. Kanjouri, «Controllable quantum valley pumping with high current in a silicene junction», Nanotechnology **27**, 495202 (2016).

[238]B. Kaestner y V. Kashcheyevs, «Non-adiabatic quantized charge pumping with tunable-barrier quantum dots: a review of current progress», Reports on Progress in Physics **78**, 103901 (2015).

[239]L. E. F. Foa Torres, H. L. Calvo, C. G. Rocha y G. Cuniberti, «Enhancing single-parameter quantum charge pumping in carbon-based devices», Applied Physics Letters **99**, 092102 (2011).

[240]H. Lira, Z. Yu, S. Fan y M. Lipson, «Electrically Driven Nonreciprocity Induced by Interband Photonic Transition on a Silicon Chip», Physical Review Letters **109**, 033901 (2012).

[241]N. N. Taleb, *Antifragile: Things That Gain from Disorder*, Incerto (Random House Publishing Group, New York, United States, 2012).

[242]Y. Yao, F. Ye, X.-L. Qi, S.-C. Zhang y Z. Fang, «Spin-orbit gap of graphene: First-principles calculations», Physical Review B **75**, 041401 (2007).

[243]A. H. Castro Neto y F. Guinea, «Impurity-Induced Spin-Orbit Coupling in Graphene», Physical Review Letters **103**, 026804 (2009).

[244]M. Ezawa, «Monolayer Topological Insulators: Silicene, Germanene, and Stanene», Journal of the Physical Society of Japan **84**, 121003 (2015).

[245]L. Tao, E. Cinquanta, D. Chiappe, C. Grazianetti, M. Fanciulli, M. Dubey, A. Molle y D. Akinwande, «Silicene field-effect transistors operating at room temperature», Nature Nanotechnology **10**, 227-231 (2015).

[246]L. E. F. Foa Torres, V. Dal Lago y E. Suárez Morell, «Crafting zero-bias one-way transport of charge and spin», Physical Review B **93**, 075438 (2016).

[247]V. Dal Lago, E. Suárez Morell y L. E. F. Foa Torres, «One-way transport in laser-illuminated bilayer graphene: A Floquet isolator», Physical Review B **96**, 235409 (2017).

[248]S. Choudhury y E. J. Mueller, «Stability of a Floquet Bose-Einstein condensate in a one-dimensional optical lattice», Physical Review A **90**, 013621 (2014).

[249]N. Goldman, J. Dalibard, M. Aidelsburger y N. R. Cooper, «Periodically driven quantum matter: The case of resonant modulations», Physical Review A **91**, 033632 (2015).

[250]A. Quelle, M. O. Goerbig y C. M. Smith, «Bandwidth-resonant Floquet states in honeycomb optical lattices», New Journal of Physics **18**, 015006 (2016).

[251]M. Aidelsburger, M. Lohse, C. Schweizer, M. Atala, J. T. Barreiro, S. Nascimbène, N. R. Cooper, I. Bloch y N. Goldman, «Measuring the Chern number of Hofstadter bands with ultracold bosonic atoms», Nature Physics **11**, 162-166 (2015).

[252]F. Cardano y col., «Detection of Zak phases and topological invariants in a chiral quantum walk of twisted photons», Nature Communications **8**, 15516 (2017).

[253]J. F. Sherson, C. Weitenberg, M. Endres, M. Cheneau, I. Bloch y S. Kuhr, «Single-atom-resolved fluorescence imaging of an atomic Mott insulator», Nature **467**, 68-72 (2010).

[254]W. S. Bakr, A. Peng, M. E. Tai, R. Ma, J. Simon, J. I. Gillen, S. Fölling, L. Pollet y M. Greiner, «Probing the Superfluid-to-Mott Insulator Transition at the Single-Atom Level», Science **329**, 547-550 (2010).

[255]A. Cresti, D. Van Tuan, D. Soriano, A. W. Cummings y S. Roche, «Multiple Quantum Phases in Graphene with Enhanced Spin-Orbit Coupling: From the Quantum Spin Hall Regime to the Spin Hall Effect and a Robust Metallic State», Physical Review Letters **113**, 246603 (2014).

[256]F. Calleja y col., «Spatial variation of a giant spin-orbit effect induces electron confinement in graphene on Pb islands», Nature Physics **11**, 43-47 (2015).

[257]S. O. Valenzuela y M. Tinkham, «Direct electronic measurement of the spin Hall effect», Nature **442**, 176-179 (2006).

[258]C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, E. M. Hankiewicz, L. W. Molenkamp, J. Maciejko, X.-L. Qi y S.-C. Zhang, «Spin polarization of the quantum spin Hall edge states», Nature Physics **8**, 486-491 (2012).

[259]R. V. Gorbachev y col., «Detecting topological currents in graphene superlattices», Science **346**, 448-451 (2014).

[260]S. S. Hong, W. Kundhikanjana, J. J. Cha, K. Lai, D. Kong, S. Meister, M. A. Kelly, Z.-X. Shen e Y. Cui, «Ultrathin Topological Insulator Bi2Se3 Nanoribbons Exfoliated by Atomic Force Microscopy», Nano Letters **10**, PMID: 20698625, 3118-3122 (2010).

[261]B. Bradlyn, L. Elcoro, J. Cano, M. G. Vergniory, Z. Wang, C. Felser, M. I. Aroyo y B. A. Bernevig, «Topological quantum chemistry», Nature **547**, 298-305 (2017).

[262]Y.-Y. He, H.-Q. Wu, Z. Y. Meng y Z.-Y. Lu, «Topological invariants for interacting topological insulators. I. Efficient numerical evaluation scheme and implementations», Physical Review B **93**, 195163 (2016).

[263]F. Grusdt, «Topological order of mixed states in correlated quantum many-body systems», Physical Review B **95**, 075106 (2017).

[264]X.-Y. Song y A. P. Schnyder, «Interaction effects on the classification of crystalline topological insulators and superconductors», Physical Review B **95**, 195108 (2017).

[265]S. Diehl, E. Rico, M. A. Baranov y P. Zoller, «Topology by dissipation in atomic quantum wires», Nature Physics **7**, 971-977 (2011).

[266]J. Loehr, M. Loenne, A. Ernst, D. de Las Heras y T. M. Fischer, «Topological protection of multiparticle dissipative transport.», Nature Communications **7**, 11745 (2016).

[267]Y. L. Dong, T. Neupert, R. Chitra y S. Schmidt, «Signatures of topological quantum phase transitions in driven and dissipative qubit arrays», Physical Review B **94**, 035441 (2016).

[268]D. Castelvecchi, «The shape of things to come», Nature **547**, 272-274 (2017).